

„Hyperspektrale Erkennung für die Polymersortierung“

BACHELORARBEIT

Hochschule Mittweida

Fakultät Mathematik/ Naturwissenschaften/ Informatik

Fachrichtung Physikalische Technik

Eingereicht von Robert Siegel

Geboren am 09.01.1988 in Berlin

Betreuer: Prof. Dr. rer. nat. Bernhard Steiger

Betreuer: Dr. rer. nat. Philipp Wollmann

Gliederung

ABBILDUNGSVERZEICHNIS	4
TABELLENVERZEICHNIS	5
FORMELN/EINHEITEN UND ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS.....	6
1. AUFGABENSTELLUNG.....	8
2. THEORETISCHER TEIL UND VORARBEITEN.....	9
2.1. PRINZIP DES HYPERSPECTRAL IMAGING	9
2.1.1. BEZEICHNUNGEN.....	10
2.1.2. DETEKTOR.....	12
2.1.3. AUFNAHME EINES SPEKTRUMS.....	12
2.1.4. RAUSCHEN DES HSI-DETEKTORS	16
2.2. DEMONSTRATOR	19
2.3. LICHTQUELLEN	21
2.4. NIR-SPEKTROSKOPIE	22
2.5. CHEMOMETRISCHES AUSGANGSMODELL	23
2.5.1. KLASSEN	25
2.5.2. DATENREDUKTION	26
2.5.3. MODELLBILDUNG.....	26
3. EXPERIMENTELLER TEIL/DURCHFÜHRUNG.....	28
3.1. DEMONSTRATOR	28
3.1.1. AUFBAU	28
3.1.2. LICHTQUELLEN AUSWAHL.....	28
3.2. TESTEN DES CHEMOMETRISCHEN AUSGANGSMODELLS.....	29
3.3. SPEKTRENAUSWAHL.....	31
3.4. PARAMETER AUSLEGUNG	32
3.5. VERÄNDERUNG DES STANDARD MATERIALS.....	33
3.6. MODIFIZIERUNG DES AUSGANGSMODELLS.....	34
3.7. TEST DER REPRODUZIERBARKEIT	34
3.8. FAKTOREN DER OFFSETVERSCHIEBUNG	35
4. ERGEBNISSE	37
4.1. LICHTQUELLE.....	37
4.2. SPEKTRENAUSWAHL.....	37
4.3. ERKENNUNGSRATE.....	38
4.4. CHEMOMETRISCHE AUSWERTUNG	39
4.5. OFFSETVERÄNDERUNG.....	40
5. ZUSAMMENFASSUNG	48
6. AUSBLICK.....	49
7. LITERATURVERZEICHNIS	50
8. ANHANG	51
8.1. BENUTZTEN WELLENLÄNGEN IN DEN CHEMOMETRISCHEN MODELLEN	51
8.2. ERKLÄRUNG DER REFERENZSPANNUNGEN	52
8.3. ÜBERSICHT SOFTWARESEITIGE PARAMETER	53
8.4. HARDWARESEITIGE PARAMETER DER NIR KAMERA.....	54
8.5. PARAMETERSATZSUCHE	55

8.6.	HAUPTKOMPONENTENANALYSE	56
8.7.	VERWENDETES TEMPERATURMESSGERÄT	57
9.	DANKSAGUNG	58
10.	SELBSTÄNDIGKEITSERKLÄRUNG	58

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1.1 Prinzip des Hyperspectral Imaging	9
Abbildung 2.1.1.1 Darstellung einer Aufnahmelinie	10
Abbildung 2.1.1.2 Aufnahme eines Hypercubes	11
Abbildung 2.1.2.1 Detektorskizze	12
Abbildung 2.1.3.2 Offset/Dunkelmessung einer Spalte/Spektrum	13
Abbildung 2.1.3.3 Einkanalspektrum des Materials ABS	13
Abbildung 2.1.3.4 Einkanalspektrum, von welchem das softwarehinterlegte Offset abgezogen wurde	14
Abbildung 2.1.3.5 Einkanalspektrum des Materials ABS und in der Software hinterlegtes Einkanalspektrum des Materials Spektralon jeweils reduziert um das softwarehinterlegte Offset	14
Abbildung 2.1.3.6 diffuses Reflexionsspektrum des Material ABS	15
Abbildung 2.1.3.7 Vektornormiertes diffuses Reflexionsspektrum des Materials ABS	16
Abbildung 2.1.4.1 Standardabweichung des Offsets von 20000 Pixeln	17
Abbildung 2.1.4.3 Zwei Aufnahmen der Spalte/Spektrum 60, von welchen der softwarehinterlegte Offset dieser Spalte/Spektrum subtrahiert wurde	17
Abbildung 2.1.4.4 Zwei Pixelpositionen einer Spalte und der dazugehörige Spaltenmittelwert	18
Abbildung 2.1.4.5 Vergleich von drei Spaltenmittelwerten	19
Abbildung 2.2.1 Geplanter Demonstrator [1]	19
Abbildung 2.2.2 Schema des Demonstratoraufbaus	20
Abbildung 2.2.3 Aufbau des Demonstrators	20
Abbildung 2.4.1 Diffuse Reflexionsspektren von ausgewählten Polymeren	23
Abbildung 2.5.1 Schematischer Ablauf der Erkennung	24
Abbildung 2.5.2.1 Vektornormiertes diffuses Reflexionsspektrum (ABS), die im chemometrischen Modell benutzten Wellenlängen wurden markiert	26
Abbildung 3.1.2.1 Verwendetes Halogenleuchtmittel	28
Abbildung 3.1.2.2 Emission der verwendeten Leuchtmittel subtrahiert mit dem softwarehinterlegten Offset, aufgezeichnet mit dem NIR HSI System,	29
Abbildung 3.2.1 Vergleich der diffusen Reflexionsspektren der Polymere auf dem Testpapier	30
Abbildung 3.2.2 Testpapier	30
Abbildung 3.3.1 Grafische Darstellung des Spektrenfilters	31
Abbildung 3.3.2 Nach Anwendung des Filters Förderband ausgeblendet	31
Abbildung 3.5.1 Vergleich der Standardmaterialien	33
Abbildung 3.8.1 Offsetverschiebung bei Messungen mit der Herstellersoftware	35
Abbildung 4.1.1 Verteilung der Intensität über die Zeilen/Aufnahmelinie	37
Abbildung 4.3.1 Auswahl von 40 Spektren des Polymers PMMA weiß	38
Abbildung 4.5.1 Vergleich der Reflexionsspektren des Materials ABS nach zwei Stunden	40
Abbildung 4.5.2 mittlere Offsetverschiebung der Spalte/Spektrum 60 nach zwei Stunden um $421 \frac{\text{mV}}{(\text{nm})}$	40
Abbildung 4.5.4 vektornormierte Spektren des Materials ABS	42
Abbildung 4.5.5 mittlerer Pixelwert von Spalte 60 und Kühllufttemperatur in Abhängigkeit von der Zeit	44

Abbildung 4.5.6 Lineare Abhängigkeit zwischen Kühllufttemperatur und Mittelwert der Pixelwerte von Spalte 60	45
Abbildung 4.5.7 Kühllufttemperatur und Mittelwert der Pixelwerte von Spalte 60 bei einer zeitlich schnellen und hohen Temperaturveränderungen in Abhängigkeit von der Zeit.....	46
Abbildung 8.6.1 Ausreißererkennung anhand einer Hauptkomponentenanalyse.....	56
Abbildung 8.7.1 Protokoll der Kalibrierung für verwendetes Temperaturmessgerät.....	57

Tabellenverzeichnis

Tabelle 0.1 Verwendete Materialien	7
Tabelle 2.1 charakteristische Banden von Kohlenwasserstoffen im Nahinfraroten Bereich [3]	23
Tabelle 2.2 Klassen in den chemometrischen Modellen	25
Tabelle 2.3 Kennzahlen des Ausgangsmodells [1].....	27
Tabelle 4.1 Vergleich der chemometrischen Modelle.....	39
Tabelle 4.2 Vergleich der Spektren bei unterschiedlichen Offset	43
Tabelle 4.3 Vergleich der Offsetveränderung bei veränderten Parametern.....	47
Tabelle 8.1 Verwendeten Wellenlängen in den chemometrischen Modellen	51
Tabelle 8.2 Unterschiede zwischen den Herstellersoftware und nun vorhandener Software.....	53
Tabelle 8.3 Parameter der NIR Kamera bei der Aufnahme der Spektren für Modell I.....	54
Tabelle 8.4 Suche der idealen Parameter für die Messungen des Testpapiers	55
Tabelle 8.5 Spektren des Polymers PMMA klar, die durch die Hauptkomponentenanalyse als Ausreißer erkannt wurden.....	56

Formeln/Einheiten und Abkürzungsverzeichnis

ortsabhängiger Punkt	Position auf dem Förderband
HSI	Hyperspectral Imaging
NIR HSI	Nahinfrarotes Hyperspectral Imaging
Polymere	zerteilte Polymerstücke mit einem Einzelgewicht von ca. 1 g
Spektralon	„ist ein Material aus gesintertem Polytetrafluorethylen (umgangssprachlich Teflon), das einen äußerst hohen und gleichmäßigen integralen diffusen Reflexionsgrad sowohl im Ultravioletten (UV) als auch im Sichtbaren (VIS) und im nahen Infrarotbereich (NIR) des elektromagnetischen Spektrums aufweist.“ [1]
vektornormiert	Funktion des Programms zur chemometrischen Auswertung Unscrambler X 10.1 (CAMO Software AS, Norwegen)
Erkennungsrate	Prozentuale Angabe, wie viele Spektren des Testdatensatzes bei der chemometrischen Auswertung der richtigen Klasse zugeordnet werden

Definition Pixelwert:

Ein Pixel besitzt einen Pixelwert P mit folgender Abhängigkeit

$$P = k * \int I_{\lambda} * dA_{Pixel}$$

P = Pixelwert $\left[\frac{mV}{nm}\right]$ (Millivolt pro Nanometer)

k = Konstante – ist von mehreren Variablen abhängig u. a. Frames pro Sekunde, Belichtungszeit. $\left[\frac{mV}{W}\right]$

I_{λ} = auftreffende Intensität auf den Pixel über einen kleinen Wellenlängenbereich $\left[\frac{W}{m^2 * nm}\right]$

A_{Pixel} = Fläche eines Pixels $[m^2]$

Tabelle 0.1 Verwendete Materialien

Abkürzung	Bezeichnung
ABS	Acrylnitril-Butadien-Styrol
CA	Celluloseacetat
PA	Polyamid
PC	Polycarbonat
PE	Polyethylen
PMMA	Polymethylmethacrylat
POM	Polyoxymethylen
PP	Polypropylen
PS	Polystyrol
PVC	Polyvinylchlorid
SAN	Styrol-Acrylnitril
TPE	Thermoplastische Elastomere

1. Aufgabenstellung

Das Fraunhofer Institut für Werkstoff- und Strahltechnik Dresden (IWS) beschäftigt sich im Rahmen des von der Allianz Industrie und Forschung (AIF) geförderten Forschungs- und Entwicklungsprojektes „HiCycl“ mit der sortenreinen Trennung von Kunststoffen zur Erhöhung der Materialeffizienz und der Durchsetzung von Nachhaltigkeit im Produktionssektor. Innerhalb des Projektes soll erstmalig ein spektroskopisch und gleichzeitig auch lateral auflösendes Sensorsystem (Hyperspektral Imaging – HSI) angewandt werden, das optisch-spektroskopisch sowohl den Kunststofftyp eines Probenstücks als auch seine Lage auf einem Förderband zuordnen kann. Auf dieser Basis kann eine Sortierung von Kunststoffgranulatmischungen in hochreine Fraktionen präzise erfolgen.

Im Rahmen des dreimonatigen Praktikums im Studienfach Physikalische Technik wurde eine Software für ein HSI-System programmiert, um die Steuerung, die anfangs über mehrere parallel laufende Programme erfolgte, zu vereinfachen. Innerhalb dieser Bachelorarbeit war es nun Ziel einen Demonstrator aufzubauen, der die vorhandenen chemometrischen Modelle zur sortenreinen Trennung der Kunststoffe nutzt, um über die aufgenommenen HSI-Spektren ein Kunststoffteilchen schnell einer bekannten Kunststoffsorte zuzuordnen und damit eine hohe Sortenreinheit von über 99% zu gewährleisten.

2. Theoretischer Teil und Vorarbeiten

2.1. Prinzip des Hyperspectral Imaging

Spektrale Imaging-Techniken werden genutzt, um die spektralen Informationen einer Probe orts aufgelöst darzustellen. Man unterscheidet grundlegend zwischen Mapping- und Imaging-Verfahren:

Imaging:

Gleichzeitige Aufnahme von Spektren von mehreren ortsabhängigen Punkten.

Mapping:

Die Spektren von mehreren ortsabhängigen Punkten werden nacheinander aufgenommen, d. h. Aufnahme eines Spektrums eines ortsabhängigen Punktes, Verfahren der Messapparatur oder Probe und erneute Spektrenaufnahme.

Das HSI-System verbindet diese beiden Ansätze, um eine erhöhte Datendichte zu erzeugen. Die Messanlage dient zur Aufnahme von elektromagnetischen Spektren, jeweils abhängig nach Kamerasystem im sichtbaren Bereich (323,3 bis 1109,9 nm) oder im nahen infraroten Bereich (806,4 bis 2723,1 nm).

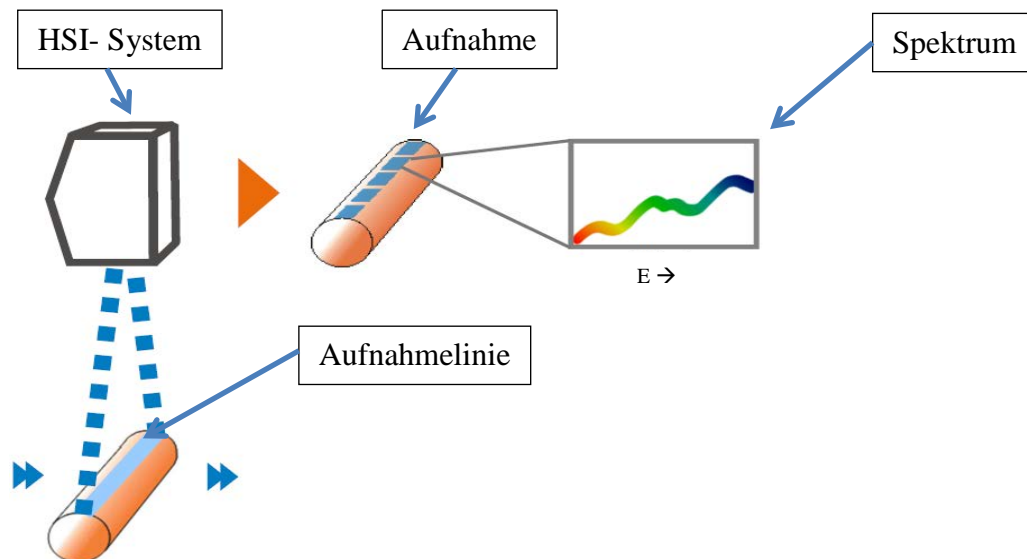


Abbildung 2.1.1 Prinzip des Hyperspectral Imaging

2.1.1. Bezeichnungen

Aufnahmelinie:



Abbildung 2.1.1.1 Darstellung einer Aufnahmelinie

Ein Hyperspektral Imaging System zeichnet mehrere ortsabhängige Punkte gleichzeitig spektral aufgelöst auf. Diese bilden die Aufnahmelinie. Die Breite und die Länge der Aufnahmelinie sind abhängig von der Entfernung zwischen Kamera und Förderband. Weiterhin ist die Länge vom verwendeten Objektiv abhängig.

Laterale Auflösung:

Ist abhängig von der Anzahl der Spalten des jeweiligen Detektors. Jede Spalte auf dem Detektor zeichnet einen Teil der Aufnahmelinie auf. Wenn beispielsweise eine Aufnahmelinie 30 cm breit ist und der Detektor 320 Spalten hat, steht eine Spalte auf dem Detektor, für ein 900 μm breites Teilstück auf der Aufnahmelinie.

Spektrale Auflösung:

Durch ein holografisches Gitter wird die elektromagnetische Strahlung gebeugt und gezielt auf die Pixel des Detektors gelenkt. Die Spektrale Auflösung ist abhängig von der Anzahl der Zeilen des Detektors und dem verwendeten Gitter. Der Wellenlängenbereich von 806,4 nm bis 2475,6 nm wird mit einer Auflösung von 7,8 nm registriert.

Framerate:

Sie gibt an, wie viele Aufnahmen der Detektor in einer Sekunde an den Computer weiterleitet.

Geschwindigkeit der Probe / zeitliche Auflösung:

Sie gibt an, wie viel Zeit die Kamera zur Verfügung hat, um die Probe zu untersuchen. Ist die Framerate an die Bewegungsrate angepasst, so ergibt sich eine maßstabsgetreue Abbildung der Probe.

Bei einer höheren Bewegungsrate wirkt die Probe gestaucht. Bei einer niedrigeren Bewegungsrate wird die Probe in der Länge verzerrt dargestellt. Je niedriger die Bewegungsrate ist, desto detaillierter wird die Probe untersucht.

Hypercube:

Ist ein Datenkubus, der bei einer Aufnahme mit einem HSI System erzeugt wird.

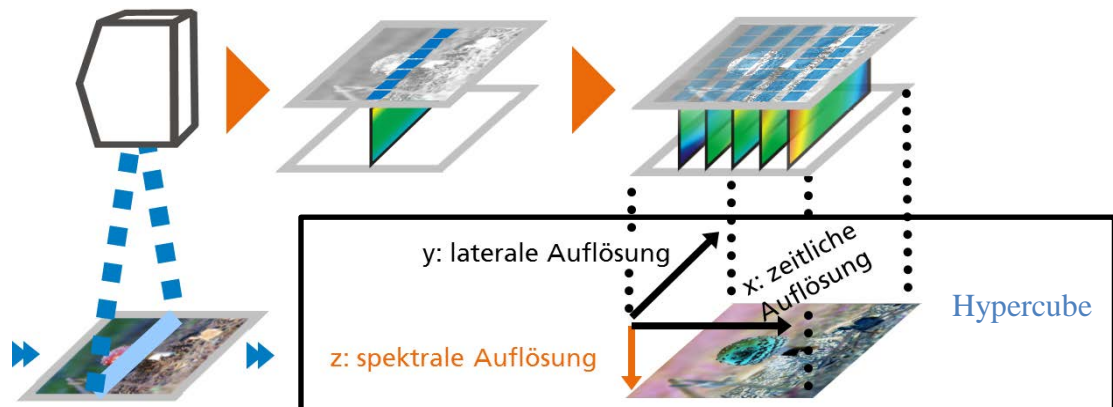


Abbildung 2.1.1.2 Aufnahme eines Hypercubes

Ein Hypercube ist ein drei dimensionaler (Daten-)Raum. Seine X- und Y-Achsen sind die Ortspositionen der Probe und die Z-Achse stellt das Spektrum jedes Ortspunktes dar.

Der Hypercube kann unterschiedlich geschnitten werden, um spezifiziertere Aussagen zu ermöglichen.

2.1.2. Detektor

In Abbildung 2.1.2.1 ist der schematische Aufbau des Detektors skizziert. Jeder Pixel hat eine laterale Position und eine spektrale Position. Jede Spalte nimmt ein Spektrum auf (spektrale Positionen) und steht für eine Position auf der aufgenommenen Aufnahmelinie (laterale Position). Durch Bewegung der Probe werden nun in jeder Spalte weitere Spektren aufgenommen, so dass eine zweidimensionale Ortsauflösung und eine eindimensionale spektrale Auflösung der Probe – der sogenannte Hypercube – entsteht.

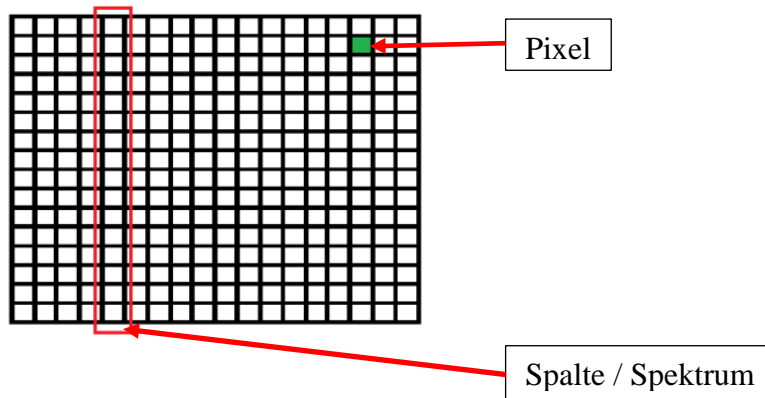


Abbildung 2.1.2.1 Detektorskizze

2.1.3. Aufnahme eines Spektrums

Die Identifikation der Polymere erfolgt über diffuse Reflexion, welche mit einem NIR HSI System gemessen wird.

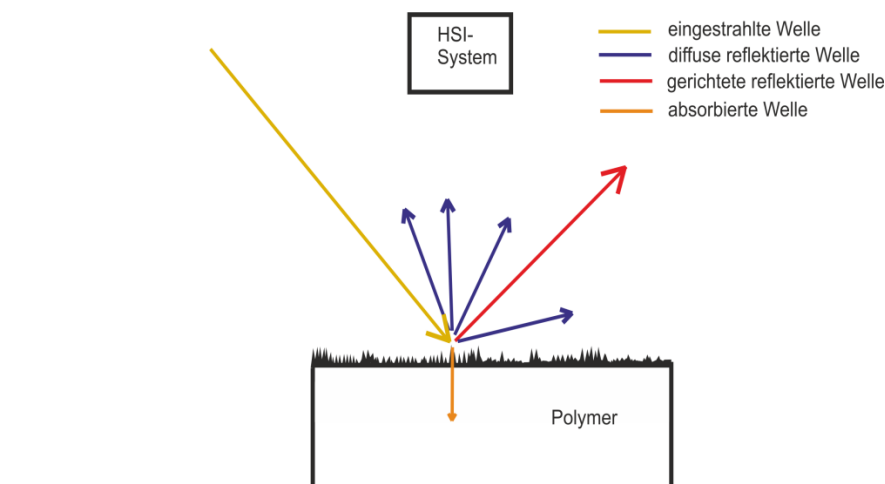


Abbildung 2.1.3.1 Darstellung der diffusen Reflexion

Die Entstehung eines aufgenommenen Spektrums wird an einem Spektrum von ABS erklärt.

Die Pixel des Detektors liefern auch dann Werte, wenn keine elektromagnetische Strahlung auf den Detektor fällt. Dieser Dunkelpixelwert wird Offset genannt und wird softwaretechnisch abgezogen. Dieses Offset ist pixelabhängig, das heißt, jeder Pixel auf dem Detektor besitzt ein unterschiedliches Offset.

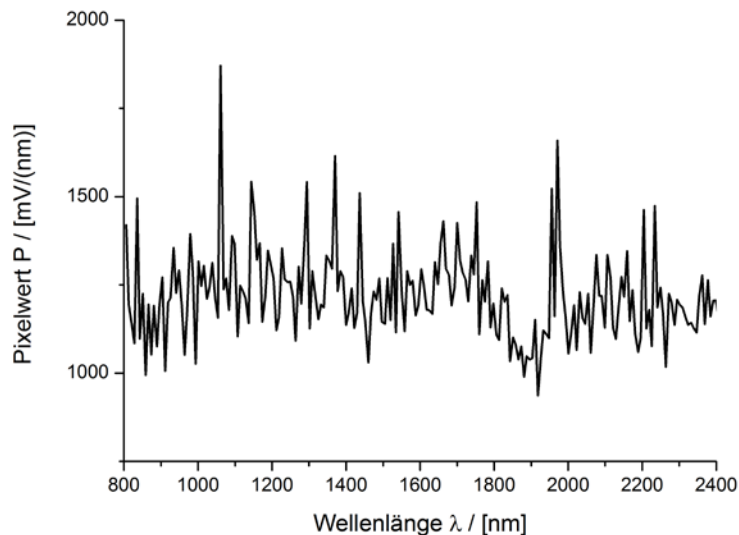


Abbildung 2.1.3.2 Offset/Dunkelmessung einer Spalte/Spektrum

Die Dunkelmessung wird bis zu 500-mal wiederholt und anschließend der Mittelwert eines jeden Pixelwertes gebildet. Dieser Mittelwert ist rauschreduziert und wird in der Software als Offset hinterlegt. Wenn die vom Material diffus reflektierte Strahlung auf den Detektor trifft, verändern sich die Pixelwerte linear zur Intensität die auf diesen Pixel trifft. Erhalten wird das Einkanalspektrum, siehe Abbildung 2.1.3.3.

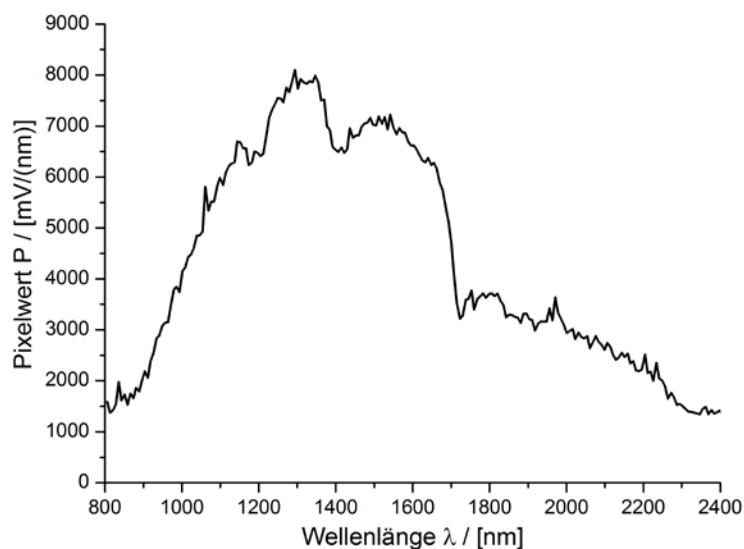


Abbildung 2.1.3.3 Einkanalspektrum des Materials ABS

Von dem Einkanalspektrum wird das gespeicherte Offset abgezogen. Das Signal wirkt geglättet, siehe Abbildung 2.1.3.4. Dies ist auf das unterschiedliche Offset je Pixel zurückzuführen.

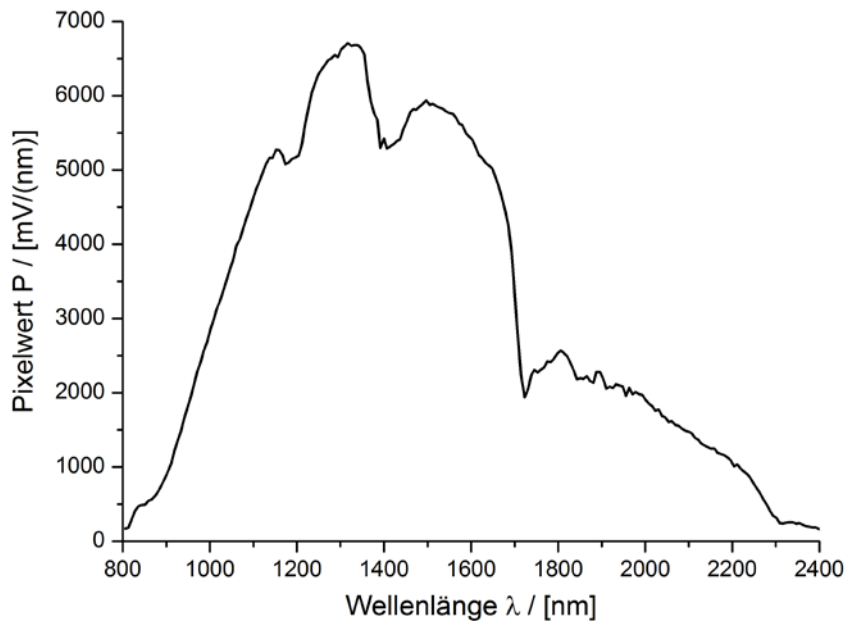


Abbildung 2.1.3.4 Einkanalspektrum, von welchem das softwarehinterlegte Offset abgezogen wurde

Das gemessene Einkanalspektrum der Probe wird nun auf das ebenfalls bis zu 500 Mal vorher gemessene und gemittelte Spektrum des Standardmaterials, siehe Abbildung 2.1.3.5 bezogen, siehe Gleichung 1.

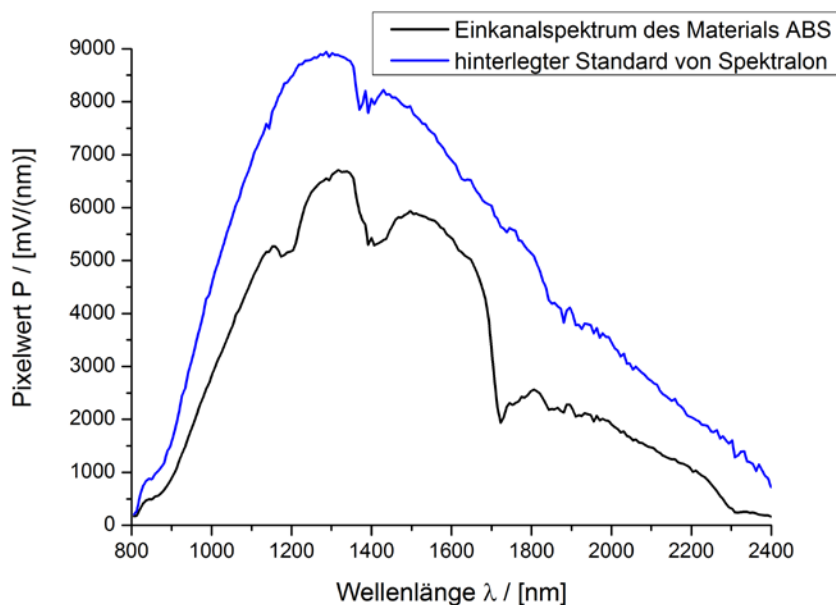


Abbildung 2.1.3.5 Einkanalspektrum des Materiales ABS und in der Software hinterlegtes Einkanalspektrum des Materiales Spektralon jeweils reduziert um das softwarehinterlegte Offset

Das zu erwartende diffuse Reflexionsspektrum sollte für alle Wellenlängen zwischen 0 und 1 liegen. Das Ergebnis wird anschließend mit 1000 multipliziert, da in der Software mit einem speichereffizienten Ganzzahl-Datentyp gearbeitet wird, siehe Abbildung 2.1.3.6.

Aus der Definition des Reflexionsgrades [5]: $R_{\text{Material}}(\lambda) = \frac{I_{\text{Material}}(\lambda)}{I_{\text{Standard}}(\lambda)}$

entsteht durch Einsetzen der Definition des Pixelwertes und kürzen der Konstanten:

Gleichung 1 :

$$R_{\text{Material}}(\lambda) = \frac{P_{\text{Material}}(\lambda)}{P_{\text{Standard}}(\lambda)}$$

$P_{\text{Material}}(\lambda)$ = Pixelwert eines aufgezeichneten Materials in Abhängigkeit von der Wellenlänge

$P_{\text{Standard}}(\lambda)$ = Pixelwert eines vorgegebenen Materials in Abhängigkeit von der Wellenlänge

$R_{\text{Material}}(\lambda)$ = diffuser Reflexionsgrad des aufgezeichneten Materials in Abhängigkeit von der Wellenlänge

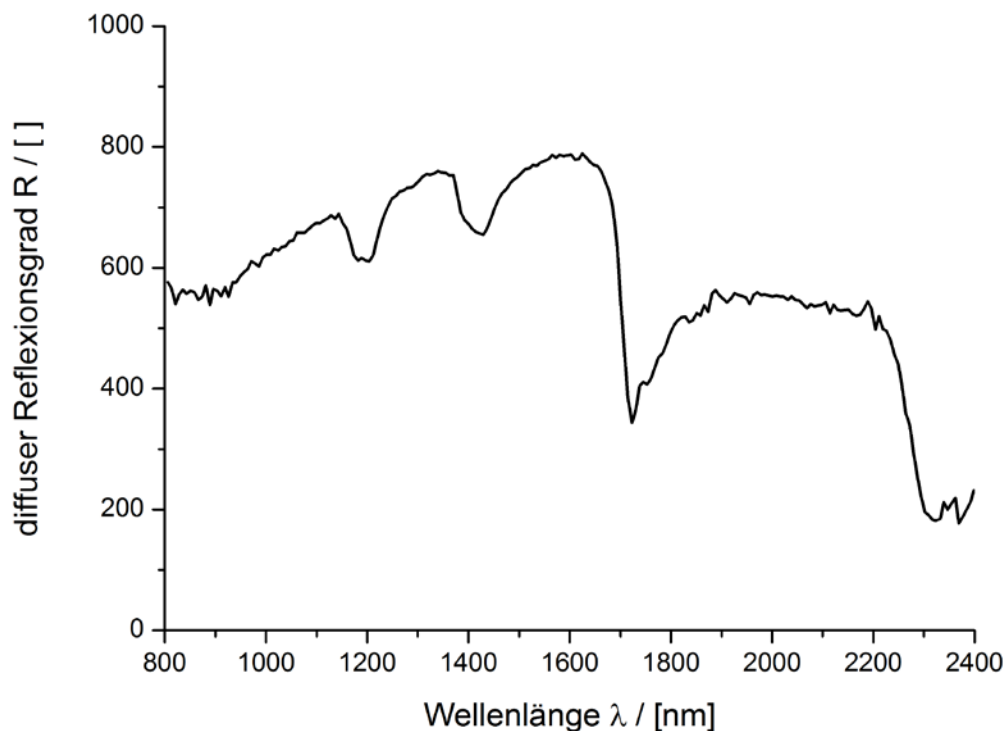


Abbildung 2.1.3.6 diffuses Reflexionsspektrum des Material ABS

Die Spektren werden für die weitere Bearbeitung mit dem chemometrischen Modell vektornormiert (Abbildung 2.1.3.7).

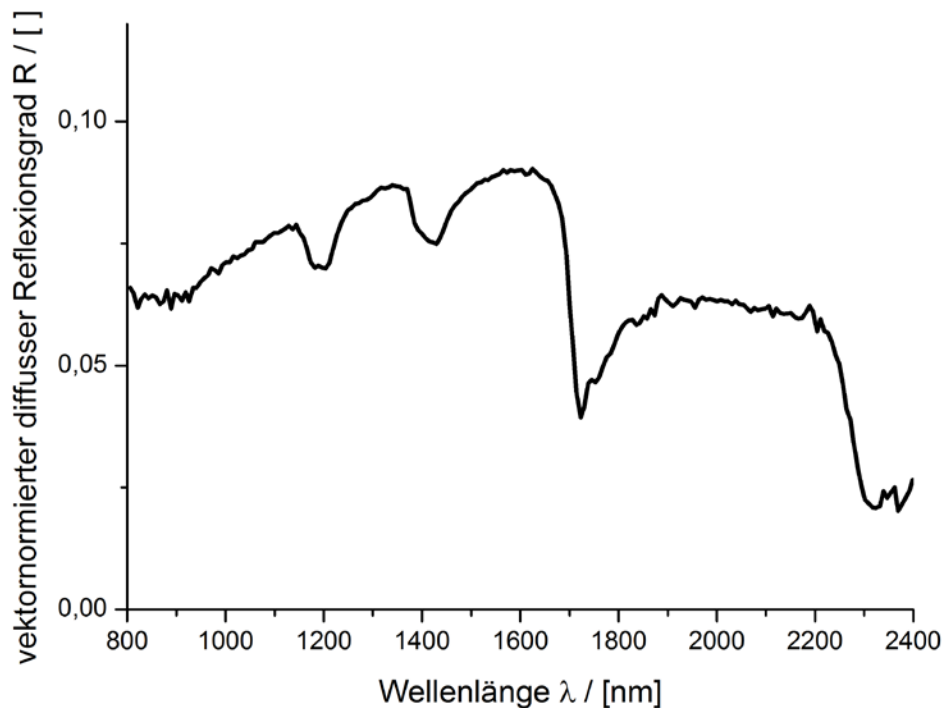


Abbildung 2.1.3.7 Vektornormiertes diffuses Reflexionsspektrum des Materials ABS

2.1.4. Rauschen des HSI-Detektors

Das Rauschen wurde wie folgt untersucht. Es wurden innerhalb einer Sekunde einhundert Dunkelmessungen aufgezeichnet. Dabei wurde davon ausgegangen, dass in dieser kurzen Zeit (1 Sekunde) keine Veränderung der Dunkelmessung auftritt. Anschließend wurde für jeden Pixel der Kamera (214 Zeilen und 320 Spalten) der Mittelwert und die Standardabweichung des Pixelwertes bestimmt, siehe Gleichung 2 – 4.

Gleichung 2 :

$$\text{Mittelwert } \bar{P} = \frac{\sum_{t=0}^{t=n} P(t)}{n}$$

Gleichung 3 :

$$\text{Stichprobenvarianz } P^{*2} = \frac{\sum_{t=0}^{t=n} [P(t) - \bar{P}]^2}{n-1}$$

Gleichung 4 :

$$\text{empirische Standardabweichung } \sigma = P^* = \sqrt{P^{*2}}$$

$P(t)$ = Pixelwert zum Zeitpunkt t

n = Anzahl aller Zeitpunkte (100)

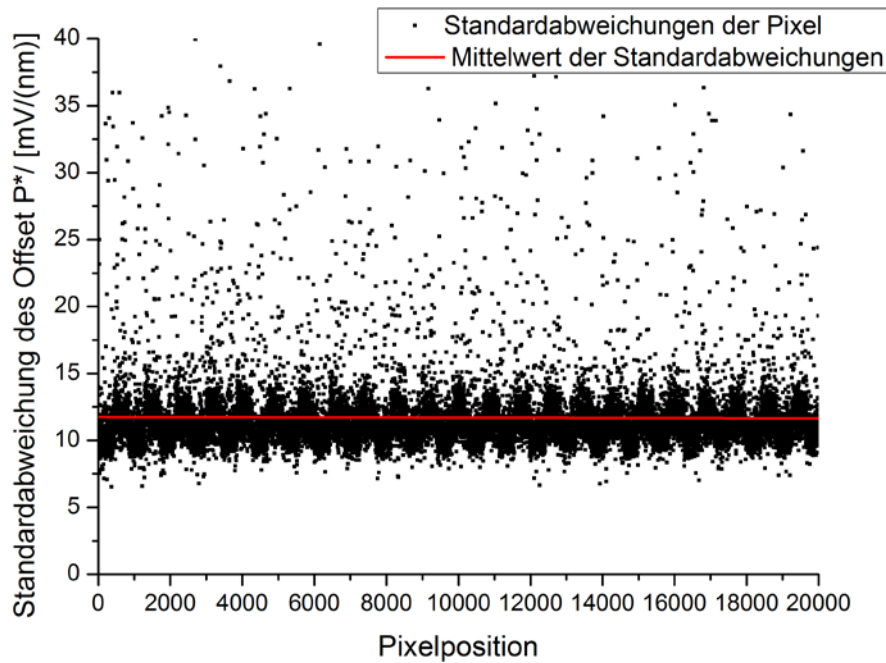


Abbildung 2.1.4.1 Standardabweichung des Offsets von 20000 Pixeln

Von den erhaltenen Standardabweichungen aller Pixelwerte, siehe Abbildung 2.1.4.1, wurde ein Mittelwert von $12 \left[\frac{\text{mV}}{\text{nm}} \right]$ berechnet. Es zeigt sich, dass es eine Konzentration um den Mittelwert der Standardabweichung des Offsets gibt, aber auch Ausreißer erkennbar sind. Es wird festgelegt, dass auf jeder Pixelposition die Standardabweichung des Offsets $12 \left[\frac{\text{mV}}{\text{nm}} \right]$ beträgt. Das Rauschen der Spalte/Spektrum 60, siehe Abbildung 2.1.4.2, weist einen Dynamikbereich von $-40 \left[\frac{\text{mV}}{\text{nm}} \right]$ bis $40 \left[\frac{\text{mV}}{\text{nm}} \right]$ auf, welcher sich innerhalb der dreifachen Standardabweichung des Offsets befindet.

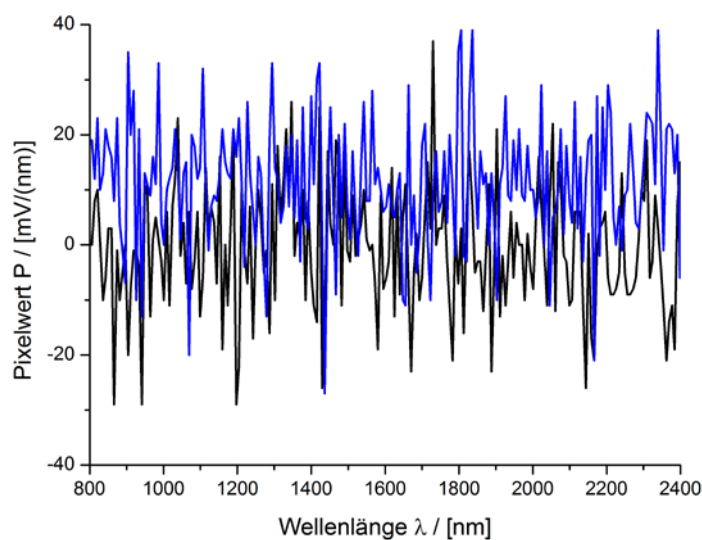


Abbildung 2.1.4.3 Zwei Aufnahmen der Spalte/Spektrum 60, von welchen der softwarehinterlegte Offset dieser Spalte/Spektrum subtrahiert wurde

Wie zuvor beschrieben, weist das Offset jedes Pixels eine unterschiedliche Höhe auf. In Abbildung 2.1.4.4 sind die zeitabhängigen Pixelwerte zweier Pixel von Spalte 60 sowie der mittlere Pixelwert derselben Spalte dargestellt. Man sieht, dass sich alle Werte, mit einem definierten Abstand, innerhalb der Standardabweichung von $12 \left[\frac{mV}{nm} \right]$ abhängig verhalten, diese Abhängigkeit konnte für alle Pixel zu ihrem Spaltenmittelwert berechnet werden. Man kann somit davon ausgehen, dass bei Betrachtung des Mittelwertes aller Pixelwerte einer Spalte die Gesamtheit dieser Spalte richtig abgebildet wird. Wenn sich daher der Mittelwert einer Spalte um z. B. $100 \left[\frac{mV}{nm} \right]$ erhöht, wird sich auch das Signal eines Pixels um etwa $100 \left[\frac{mV}{nm} \right]$ erhöhen.

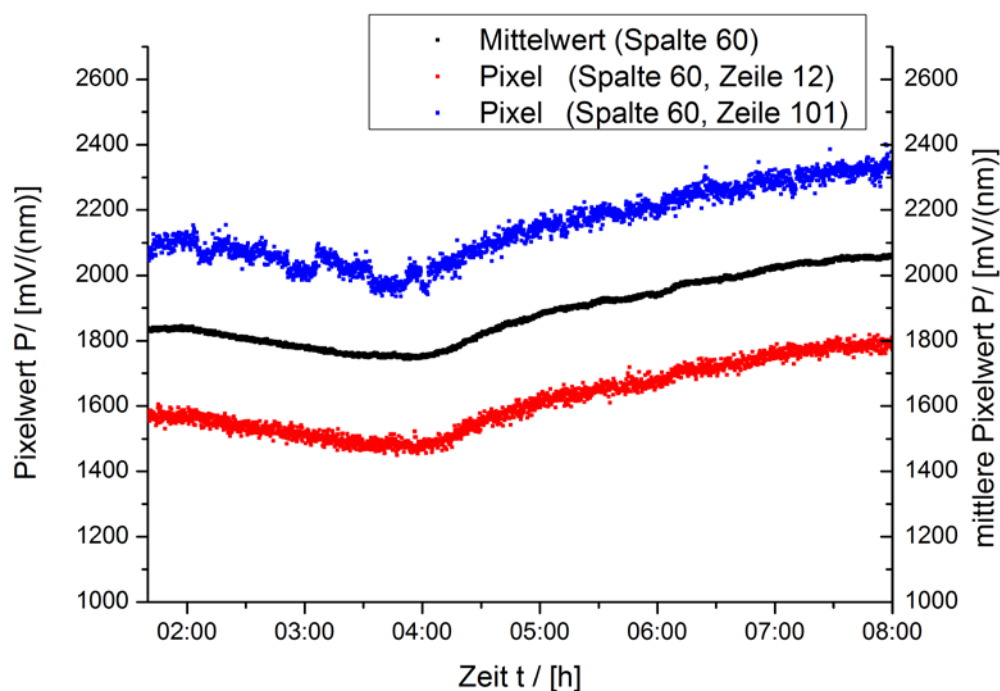


Abbildung 2.1.4.4 Zwei Pixelpositionen einer Spalte und der dazugehörige Spaltenmittelwert

In Abbildung 2.1.4.5 werden die Mittelwerte der Pixelwerte mehrerer Spalten verglichen. Auch diese zeigen einen konstanten Abstand. Es kann also davon ausgegangen werden, dass die Betrachtung des Mittelwertes aller Pixelwerte einer Spalte für die Gesamtheit aller Pixelwerte des gesamten Detektors ausreichend ist. Da die Spalte 60 keine Fehlpixel aufweist, werden die Pixelwerte dieser Spalte als repräsentativ für den gesamten Detektor betrachtet.

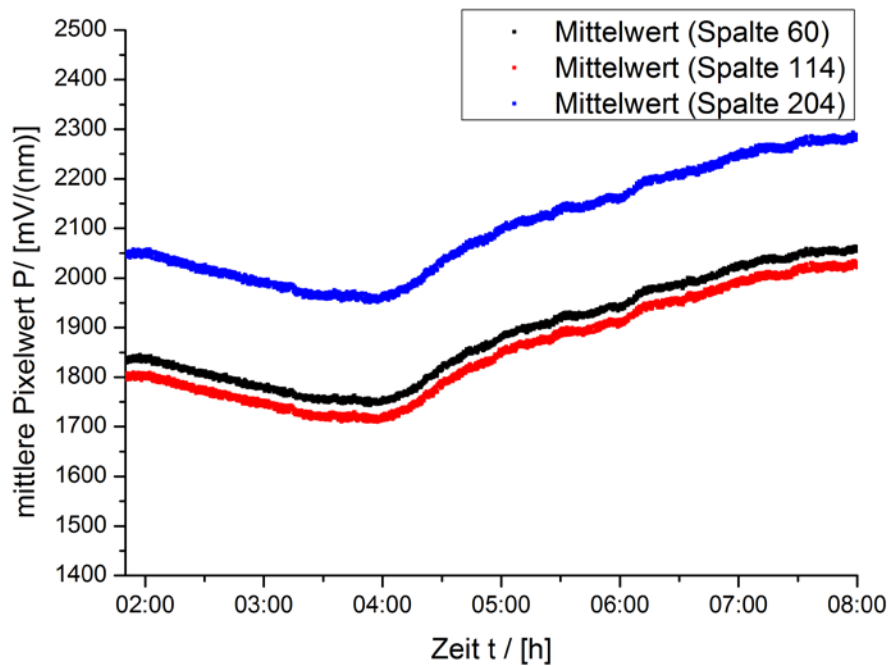


Abbildung 2.1.4.5 Vergleich von drei Spaltenmittelwerten

Alle beschriebenen Abhängigkeiten gelten nur für Dunkelmessungen und die daraus resultierenden Offsetwerte. Die Abhängigkeiten sind in der Aufwärmphase nicht gegeben.

2.2. Demonstrator

Der Demonstrator soll zeigen, dass es möglich ist, mehrere unterschiedliche Polymere mit einer Sortieranlage, dessen Hauptkomponente ein „Hyperspectral Imaging“ System ist, mit einer 99% igen Erkennungsleistung zu trennen.

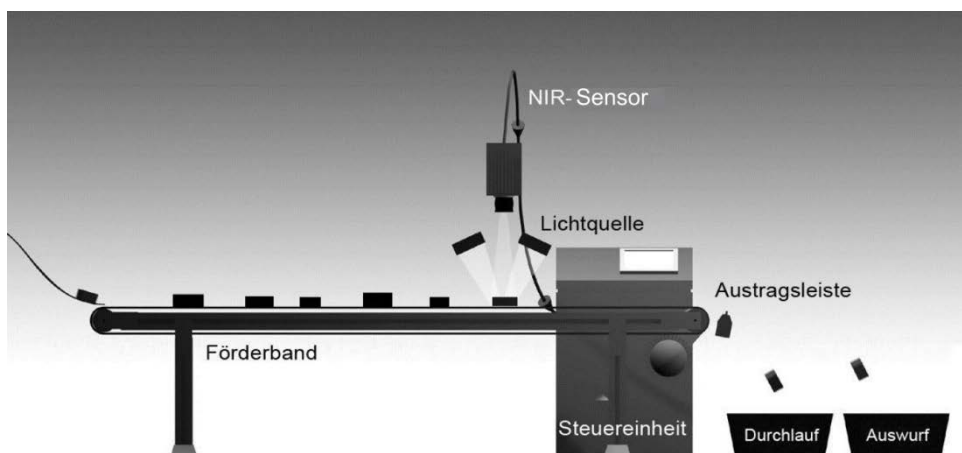


Abbildung 2.2.1 Geplanter Demonstrator [1]

Der Demonstrator besteht aus einem Förderband, auf dem die Polymerteilchen befördert werden. Lichtquellen, die auch im nahinfraroten Spektralbereich emittieren, beleuchten die Aufnahmelinie. Der NIR-Sensor (HSI-System) zeichnet die Spektren des Förderbandes und der darauf liegenden Materialien auf und leitet die Signale an einen Computer weiter. Mit dem

hinterlegten chemometrischen Modell werden die gewonnen Daten ausgewertet. Die ermittelte Zuordnung der untersuchten Kunststoffteilchen zu einer Polymersorte wird an die Steuereinheit des Ausschleussystems weitergegeben.

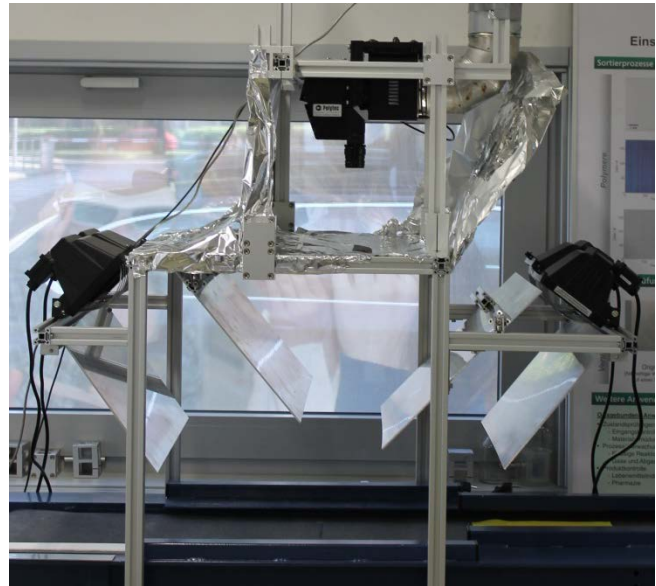
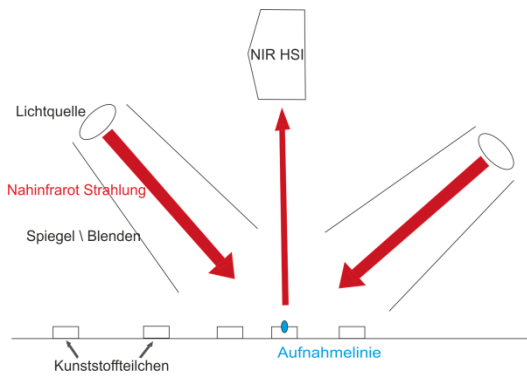


Abbildung 2.2.2 Schema des Demonstratoraufbaus

Da die Materialien und auch das Förderband nur kurzzeitig der Bestrahlung ausgesetzt werden sollen, schützen Blenden das Förderband vor erhöhter Erwärmung.

Der aktuelle Demonstrator verfügt noch nicht über das geplante Ausschleusesystem mit der dazugehörigen Steuereinheit, die Polymertrennung wird nur visuell aufgezeigt.

2.3. Lichtquellen

Die verwendete Lichtquelle bestimmt die Verteilung der Intensität auf der Aufnahmelinie und die Ausnutzung der spektralen Auflösung des Detektors. Des Weiteren bestimmt sie die Ausnutzung des Dynamikbereiches der Pixel.

Es gibt Leuchtmittel, die nach dem „Planck’schen Strahlungsgesetz“ emittieren, siehe Gleichung 5 :. Bei diesen Lichtquellen, werden Materialien erwärmt und die abgegebene Emission in Form von elektromagnetischer Strahlung als Beleuchtung genutzt.

Gleichung 5 :

$$M(\lambda, T) = \frac{2 \pi h c^2}{\lambda^5} * \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}$$

M = Strahlungsleistung in W/(m³)

c = Lichtgeschwindigkeit 299792458 m/s

λ = Wellenlänge in m

h = Plancksches Wirkungsquantum 6,62606957 * 10⁻³⁴ J * s

k_B = Boltzmann-Konstante 1,3806488 * 10⁻²³ J/K

T = absolute Temperatur (Strahlungstemperatur des erwärmten Materials) in K

Des Weiteren gibt es noch andere Möglichkeiten, um elektromagnetische Strahlung zu erzeugen. Es gibt z. B. Leuchtdioden (LED) oder Bogenlampen. Bei diesen Techniken treten charakteristische Banden in den Emissionsspektren auf, die bei bestimmten Wellenlängen zu einer erhöhten Intensität im Spektrum führt. Andere Lichtquellen wie z. B. Laser geben monochromatische Strahlung ab, die für die beabsichtigte Anwendung einer vollständigen Ausnutzung des Messbereichs im NIR nicht in Frage kommen.

Für den Demonstrator eignen sich damit Leuchtmittel, die elektromagnetische Strahlung mit einem Anteil im NIR-Bereich nach dem Planck’schen Strahlungsgesetz emittieren. Die verwendeten handelsüblichen Halogenleuchtmittel haben Farbtemperaturen von 2800 K bis 2950 K und sind kosteneffizient erhältlich.

Aufgrund des Abfalles der Strahlungsleistung an den Rändern des spektralen Messbereichs kann der Wertebereich der Pixel, die diese Wellenlängen aufnehmen, nicht ideal ausgenutzt werden. In diesen Wellenlängenbereichen wird ein schlechteres Signal-Rausch-Verhältnis erwartet, als bei Wellenlängen die mit hohen Strahlungsleistungen aufgezeichnet werden.

Die Breite der Aufnahmelinie sollte idealerweise der Breite des benutzten Förderbandes entsprechen. Vor der eigentlichen Messung der Polymere wird eine Messung eines Standardmaterials (Spektralon) innerhalb der gesamten Aufnahmelinie durchgeführt. Dadurch ist es möglich, eine Abweichung der spaltenabhängigen Intensität aufgrund der nicht ganz gleichmäßigen Bestrahlung der Aufnahmelinie zu kompensieren. Um eine örtlich konstante Lichtintensität auf der gesamten Aufnahmelinie zu gewährleisten, sollen stabförmige Lichtquellen eingesetzt werden, die geometrisch auf die Aufnahmelinie abgestimmt sind.

2.4. NIR-Spektroskopie

In den Voruntersuchungen hat sich gezeigt, dass sich die diffusen Reflexionsspektren der Polymere im Nahinfrarot-Bereich des elektromagnetischen Spektrums (780 nm – 2500 nm) voneinander unterscheiden [1]. Elektromagnetische Strahlung im NIR-Bereich weist nach Gleichung 7 wellenlängenabhängige Energien zwischen 0,5 eV (2500 nm) und 1,6 eV (780 nm) auf.

Gleichung 6:

$$E = \frac{h * c}{\lambda}$$

E = Energie eines Photons in eV

Wenn die Wellenlänge der Strahlung und die Anregungsfrequenz der Schwingung resonant sind, kommt es zur Absorption der nahinfraroten elektromagnetischen Strahlung. In den Polymeren werden in diesem Spektralbereich Kombinationsschwingungen und Oberschwingungen von Grundschrwingungen der Molekülschwingungen angeregt. Die Spektralbereiche, in denen Absorption stattfindet, werden Banden genannt.

Die Banden im NIR-Spektrum jeder Kohlenstoffwasserstoff-Verbindung sind eindeutig und können zu einer Identifizierung genutzt werden [2].

In Tabelle 2.1 sind typische Banden von Kohlenstoffwasserstoff-Verbindungen im NIR-Bereich aufgezeigt.

Tabelle 2.1 charakteristische Banden von Kohlenwasserstoffen im Nahinfraroten Bereich [3]

Wellenlänge λ / nm	Zuordnung der Schwingungen im NIR-Bereich
1150 - 1210	2. Oberschwingung -CH Streckschwingung
1700 - 1800	1. Oberschwingung -CH Streckschwingung
2000 - 2400	-CH Kombinationsbanden

In Abbildung 2.4.1 ist eine Auswahl von Spektren der zu sortierenden Polymeren im nahinfraroten Bereich dargestellt. Klar ersichtlich sind die unterschiedlichen Bandenlagen der Kohlenwasserstoff-Verbindungen.

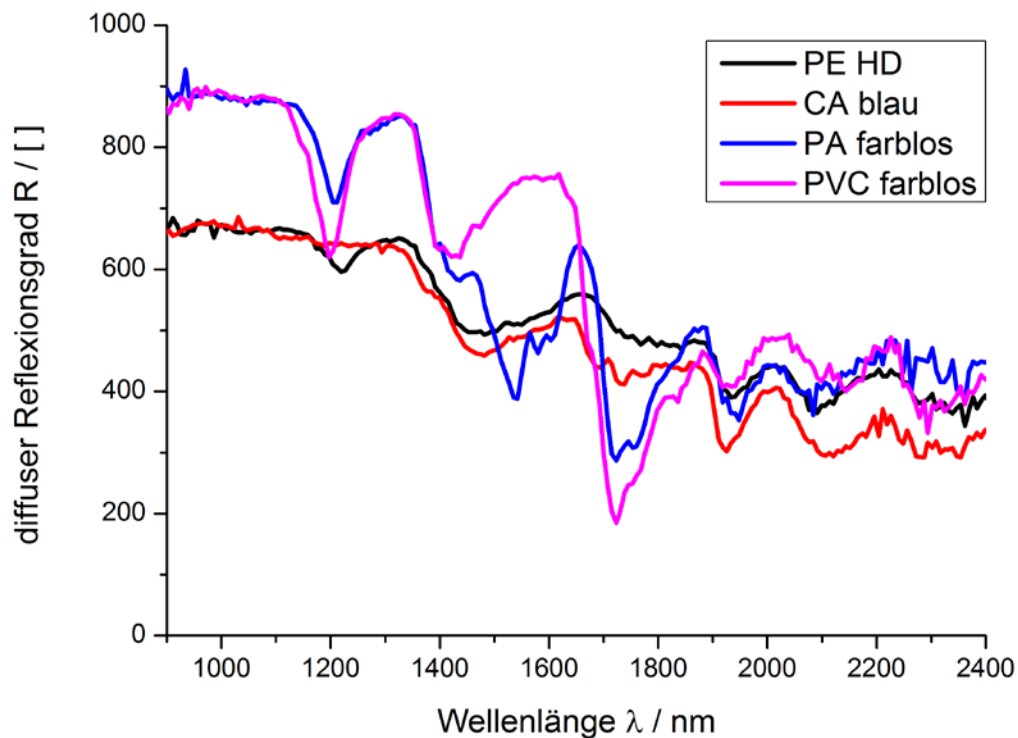


Abbildung 2.4.1 Diffuse Reflexionsspektren von ausgewählten Polymeren

2.5. Chemometrisches Ausgangsmodell

Für die Erkennung der unterschiedlichen Materialien/Polymere werden in diesem Projekt chemometrische Modelle benutzt. Chemometrische Modelle verarbeiten mit mathematischen, statistischen oder auf Logik basierenden Algorithmen Spektren, um relevante chemische Informationen zu extrahieren [1].

Hierbei zeigte sich, dass mit einem einzigen Modell keine ausreichende Genauigkeit erreicht werden konnte, um sämtliche Materialien/Polymere richtig zu klassifizieren.

Somit wurden mehrere Modelle mit unterschiedlichen Aufgaben erarbeitet, um die Anforderungen an die Reinheit der erhaltenen Kunststofffraktionen zu erreichen [1].

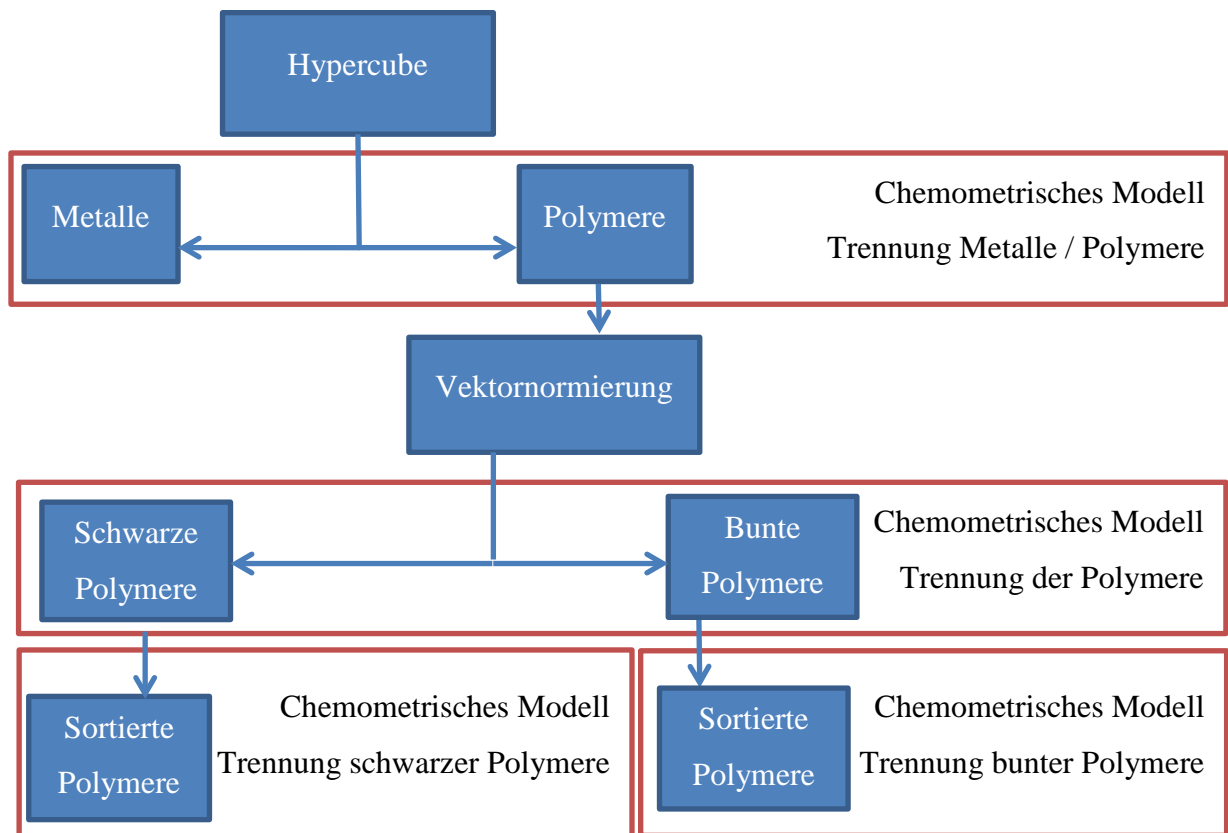


Abbildung 2.5.1 Schematischer Ablauf der Erkennung

Von den 65 Materialien die in diesem Projekt erkannt und getrennt werden sollen, gibt es 37 Polymere die nach Abbildung 2.5.1 die Klassifikation „Bunt“ erhalten haben. Aufgrund von Vorarbeiten stand fest, welche chemometrischen Modelle für die jeweilige Aufgabe gut geeignet waren. [1] Innerhalb dieser Bachelorarbeit wird auf das vorhandene Modell für die Sortierung der bunten Polymere zurückgegriffen. Für die Spektren, welche unter den Messbedingungen aufgenommen wurden, die auch bei der Erstellung des Modells vorlagen, lieferte das vorhandene Ausgangsmodell sehr gute Erkennungsraten, siehe hierzu Tabelle 2.3.

2.5.1. Klassen

Die 37 Polymere innerhalb des chemometrischen Modells zur Sortierung der bunten Polymere werden in 12 Klassen eingeteilt, wie in Tabelle 2.2 zu sehen ist. Jeder Klasse gehören die Polymere ähnlicher chemischer Zusammensetzung an. Innerhalb der Klasse PA finden sich jedoch verschiedene Polyamide wieder, in allen anderen Klassen findet man meist verschiedenfarbige aber gleichartige Polymere. Die Polymere einer Klasse werden mit dem chemometrischen Modell nicht weiter eingeteilt. Will man z. B. die verschiedenfarbigen Polymere farblich voneinander trennen, so sind jeweils weitere Modelle nötig. Die Klassifizierung wurde aus der Vorarbeit übernommen und sollte aufgrund der Vergleichbarkeit auch in dieser Bachelorarbeit beibehalten werden [1].

Tabelle 2.2 Klassen in den chemometrischen Modellen

Klassenname	Enthaltene Polymere	Anzahl enthaltene Polymere
CA	CA Farblos, CA blau, CA orange, CA gelb	4
PE	PE LD, PE HD	2
PP	PP farblos, PP glasklar, PP farblos 2,	3
PA	PA farblos, PA6 Glasfaser Anteil 15 % grau, PA6.6 Glasfaser Anteil 10-30 % grün, PA6.6 weiß mit Lack, PA6 farblos, PA6.6 weiß, PA6 grau, PA6 grau2	8
SAN	SAN grün, SAN gelb, SAN blau,	3
PVC	PVC farblos	1
PMMA	PMMA weiß, PMMA gelb, PMMA klar, PMMA blassgrün, PMMA grün,	5
POM	POM weiß	1
ABS	ABS weiß, ABS weiß2	2
PC	PC weiß, PC grau, PC blau, PC klar, PC rot,	5
TPE	TPE orange	1
PS	PS blau, PS weiß	2

2.5.2. Datenreduktion

In den Voruntersuchungen hat sich abgezeichnet, dass anstelle der Nutzung des gesamten Spektrums 19 Wellenlängen für die Klassifizierung der Polymere genügen (Abbildung 2.5.2.1, Tabelle 8.1) [1]. Diese Reduktion führt zu einer Verminderung der notwendigen Rechenleistung. Im chemometrischen Modell sind nur noch diese Wellenlängen enthalten. Alle verwendeten 19 Wellenlängen des chemometrischen Modells sind gleichmäßig gewichtet.

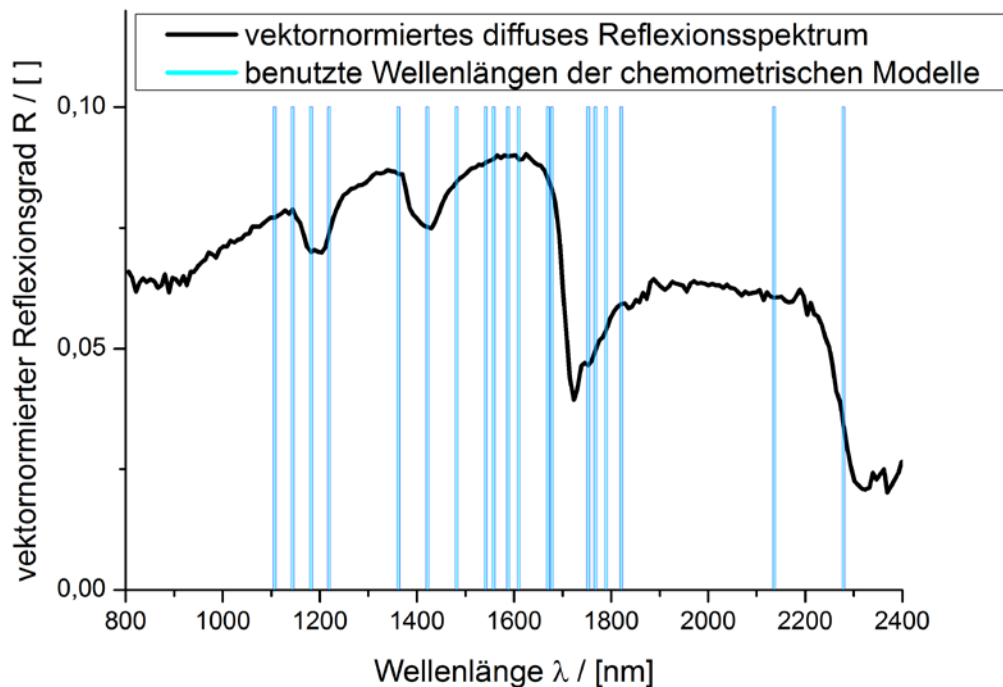


Abbildung 2.5.2.1 Vektornormiertes diffuses Reflexionsspektrum (ABS), die im chemometrischen Modell benutzten Wellenlängen wurden markiert

2.5.3. Modellbildung

Für die Modelle aus den Voruntersuchungen wurde ein Testdatensatz von 100 Spektren je Polymer zusammengestellt [1]. Die Erstellung des Modells erfolgte mit dem Programm „The Unscrambler X 10.1 (CAMO Software AS, Norwegen)“. Alle Spektren wurden vektornormiert und einer Ausreißererkennung unterzogen. Diese wurde mit einer Hauptkomponentenanalyse (engl. Principal Component Analysis) durchgeführt [1]. Die als Ausreißer erkannten Spektren wiesen häufig Spikes auf.

Je nach Polymer verblieben daher 81 - 97 Spektren für das Aufstellen des chemometrischen Modells. Diese nutzbaren Spektren wurden in ein Kalibrierdatensatz und einen Testdatensatz aufgeteilt.

Der Kalibrierdatensatz bestand je Polymer aus 74 Spektren, die verbliebenden Spektren wurden dem Testdatensatz zugeordnet. Jedem Polymerspektrum wird nun eine Klasse zugeordnet, siehe Kapitel 2.3.1.1. Danach erstellt das Programm mit Hilfe der Quadratischen Diskriminanzanalyse ein Modell mit entsprechenden Parametern [1]. Das erstellte Modell wird nun mit dem Testdatensatz getestet.

Das erstellte Ausgangsmodell, ergab folgende Kenndaten:

Tabelle 2.3 Kennzahlen des Ausgangsmodells [1]

	Ausgangsmodell
Gesamter Kalibrierdatensatz	2738 Spektren
Gesamte Anzahl an getesteten Spektren	647
Minimale getestete Spektren pro Polymer	7
Maximal getestete Spektren pro Polymer	23
Fehlerhaft erkannte Spektren	0
Mittlere Erkennungsrate	100%
Niedrigste Erkennungsrate	100%

3. Experimenteller Teil/Durchführung

3.1. Demonstrator

3.1.1. Aufbau

Die Höhe des Gestelles wurde so angepasst, dass die gesamte Breite des Förderbandes von der Kamera erfasst wurde und demnach die Länge der Aufnahmelinie der Breite des Förderbandes entspricht. Für den Aufbau des Demonstrators wurde ein Gestell aus 30 mm Aluprofilen zusammengesetzt. Des Weiteren wurden Halterungen für die Lampen und die benötigten Blenden verwendet. Die Blenden bestehen aus 3 mm dicken, polierten Aluminiumtafeln.

3.1.2. Lichtquellenauswahl

Eine Bauform, die geometrische und wirtschaftliche Vorteile besitzt, ist eine Lichtquelle in Form eines Stabes.

Bei einem Test eines kostengünstigen Halogenfluters mit einer R7s Halterung und einem dazu passenden Halogenleuchtmittel konnte gezeigt werden, dass diese Bauweise für den Demonstrator nutzbar ist. Um Schattenwirkungen zu verringern, wurde das Förderband von zwei Seiten beleuchtet. Die Eingangsleistung jeder Lampe beträgt 400 Watt.

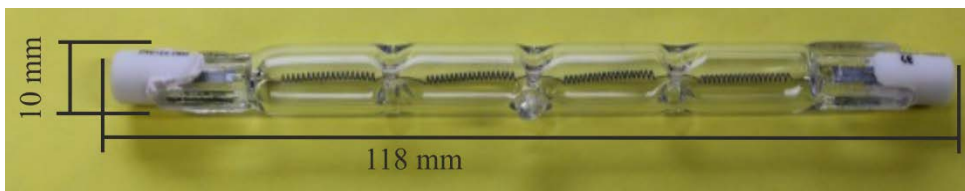


Abbildung 3.1.2.1 Verwendetes Halogenleuchtmittel

Das detektierte Emissionsmaximum der Lampen liegt bei 1260 nm, siehe Abbildung 3.1.2. Um die Intensität am Detektor noch weiter zu erhöhen, wurden zusätzlich weitere 2 Lampen gleicher Leistung dem Aufbau hinzugefügt. Da diese insgesamt erheblich höhere Strahlungsleistung teilweise zur Überbelichtung führte, wurden alle vier Lampen durch Lampen mit einer Leistung von 200 Watt ersetzt. Mit diesen vier Lampen alle Messungen durchgeführt.

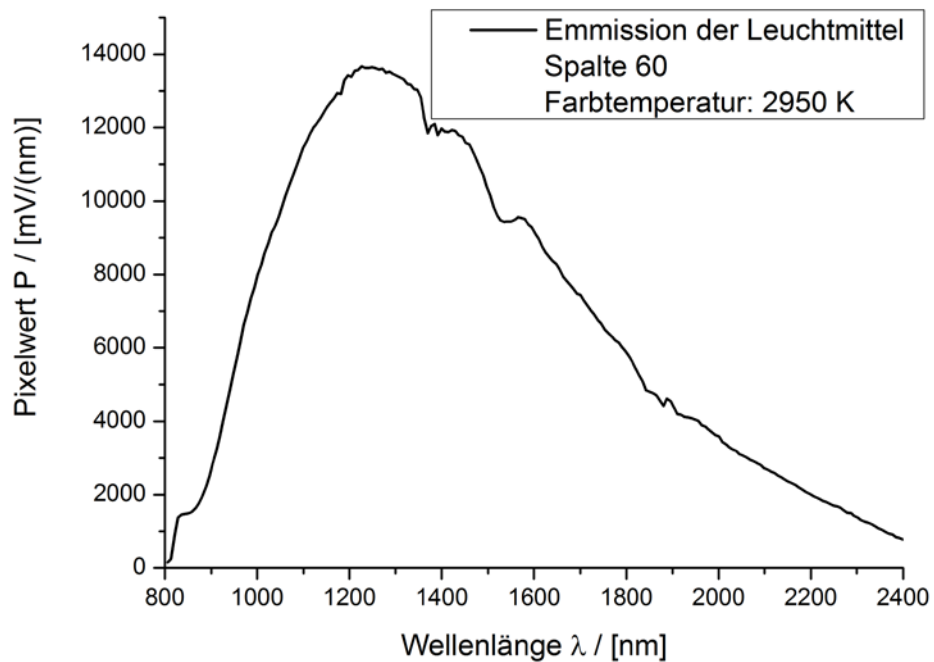


Abbildung 3.1.2.2 Emission der verwendeten Leuchtmittel subtrahiert mit dem softwarehinterlegten Offset, aufgezeichnet mit dem NIR HSI System,

3.2. Testen des chemometrischen Ausgangsmodells

Nach dem Aufbau des Demonstrators wurde überprüft, ob mit dem chemometrischen Ausgangsmodell die neu aufgenommenen Spektren der richtigen Klasse zugeordnet werden. Im Unterschied zu den Messungen der Spektren, die zum Aufstellen des Ausgangsmodells verwendet wurden, wurden nun ein veränderter Messaufbau (Lichtquellen, Abstand Kamera – Probe, Verwendung von Blenden), eine neue Software und teilweise andere Messbedingungen (Spektralonstandard, Förderbandgeschwindigkeit) verwendet.

Hierfür wurde ein Testpapier präpariert.

Auf diesem Testpapier sind zwei unterschiedliche Polymere aufgebracht, um unter verschiedenen Bedingungen reproduzierbare Testmessungen durchzuführen (siehe Abbildung 3.2.2). Die aufgetragenen Markierungen sind ebenfalls im nahinfraroten Spektralbereich sichtbar.

Die gewählten Materialien Polymethylmethacrylat (PMMA) und Polyoxymethyl (POM) sind mit dem Auge nicht unterscheidbar. Im nahinfraroten Spektrum zeichnen sich jedoch Unterschiede zwischen den Polymeren ab.

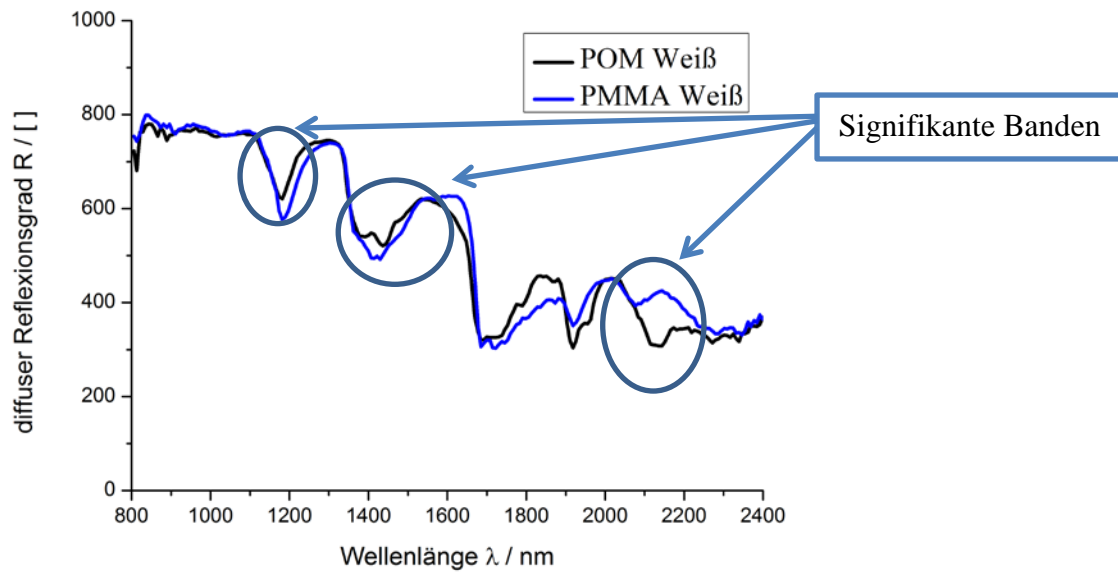


Abbildung 3.2.1 Vergleich der diffusen Reflexionsspektren der Polymere auf dem Testpapier

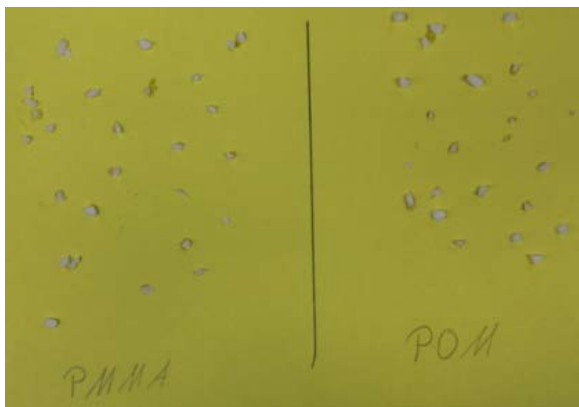


Abbildung 3.2.2 Testpapier

Einige Parameter, die bei den Aufnahmen der Spektren des Ausgangsmodells verwendet wurden, konnten wiederverwendet werden. Da aber ein großer Anteil der Parameter nicht dokumentiert war, wurden diese neu festgelegt.

Die produzierte Datenmenge mit dem Hyperspektralen Imaging System ist sehr groß, 320.000 Spektren werden in 10 Sekunden erzeugt. Deshalb wurde dieses Datenaufkommen entsprechend Kapitel 3.3 verringert.

3.3. Spektrenauswahl

Von dem hergestellten Testpapier konnte immer nur eine relativ kleine Anzahl an Spektren genutzt werden. Anfangs wurden die Spektren, welche mit dem chemometrischen Modell getestet werden sollten, per Hand ausgewählt. Diese Auswahl ist für die Automatisierung des Demonstrators nicht praktikabel.

Ziel war es deshalb, mit einem Filter die Hypercube's zu bearbeiten und die Spektren des Förderbandmaterials zu erkennen und auszublenden. Als einfachste Möglichkeit bot sich hierbei ein Schwellwertfilter an. Dieser ist programmtechnisch einfach umsetzbar und hoch effektiv im Vergleich zur Auswahl der Spektren per Hand. Bedingung hierfür ist eine spezifische Bande im nahinfraroten Spektrum des Förderbandmaterials, die von den Banden der Spektren aller weiteren Polymere abweicht. Dies sollte bei der Auswahl des Bandmaterials für den Demonstrator beachtet werden.

Im Spektrum des Testpapiers gibt es eine im Vergleich zu den Spektren der Polymere erhöhte Reflexion bei 1715 nm. Deshalb werden alle Spektren mit Reflexionsgraden von über 600 bei 1715 nm ausgeblendet. Außerdem werden alle überbelichteten Spektren mit Reflexionsgraden von über 1100 herausgefiltert.

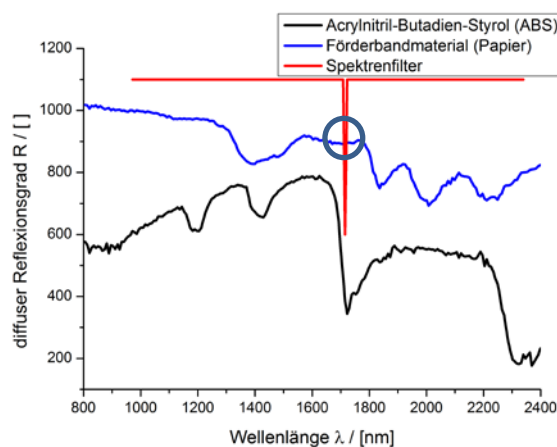


Abbildung 3.3.1 Grafische Darstellung des Spektrenfilters

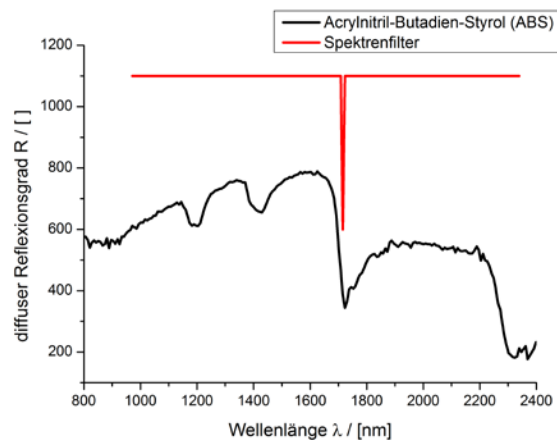


Abbildung 3.3.2 Nach Anwendung des Filters Förderband ausgeblendet

Von Abbildung 3.3.1 zu Abbildung 3.3.2 wurde der beschriebene Spektrenfilter angewendet. Das Spektrum des Förderbandmaterials wurde ausgeblendet. Die äußeren Randpositionen des Spektrums (800 nm – 900 nm und 2300 nm – 2400 nm) werden nicht vom Standardfilter betrachtet, da es durch das in diesen Bereichen schlechtere Signal-Rausch-Verhältnis möglich ist, dass sich Spektrenwerte über die festgelegte Grenze von 1100 bewegen. Diese spektralen Randpositionen werden auch in den chemometrischen Modellen nicht beachtet.

Bei der Anwendung des Standardfilters auf das Testpapier zeigt sich, dass 2216 Spektren des Materiales „PMMA weiß“ und 2610 Spektren des Polymeres „POM weiß“ vom Testpapier aufgenommen werden. Die Framerate betrug 100 Hz und das Förderband eine Vorschubgeschwindigkeit von $30 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$.

3.4. Parameterauslegung

Aufgrund der ersten Testmessung war davon auszugehen, dass die Ausnutzung des Dynamikbereiches eines Pixels nicht optimal war. Dies konnte durch eine erneute Aufnahme ohne einen Standard bestätigt werden.

Die optimale Ausnutzung des Dynamikbereiches eines Pixelwertes kann durch eine Verstärkung der Intensität verbessert werden. Dies ist auf die direkte Proportionalität der Strahlungsintensität auf den Pixelwert zurückzuführen. Die Intensität gibt an, wie viel Energie pro Zeit und Fläche eingebracht wird. Sie ist damit proportional abhängig von der Zeit die betrachtet wird und zur beobachteten Fläche.

Für die bessere Ausnutzung des Wertebereiches wurden folgende Parameter in Betracht gezogen.

- Position der Lichtquellen

Eine höhere Strahlungsintensität auf dem Förderband kann durch eine verkürzte Distanz zwischen Lichtquelle und Förderband erzeugt werden.

Die Zunahme der Intensität führt aufgrund der auftretenden Absorption zur Erwärmung der bestrahlten Teile des Demonstrators, was zu physikalischen und chemischen Veränderungen führen kann. Eine Neupositionierung der Lichtquellen ist demnach nur in beschränktem Maße sinnvoll.

- Belichtungszeit

Bei einer Erhöhung der Belichtungszeit steigt ebenfalls der Pixelwert an. Aufgrund der hohen zeitlichen Anforderung an den Durchsatz des Demonstrators bei einer Bandgeschwindigkeit von $>1 \text{ m/s}$ und einer Framerate von 200 Hz ergibt sich eine maximale Belichtungszeit zur Aufnahme eines Spektrums von fünf Millisekunden. Aufgrund der Datenübertragung und die darauffolgende Klassifizierung ist eine geringe Belichtungszeit unabdingbar. Die verwendete Belichtungszeit beträgt daher vier Millisekunden.

- Referenzspannungen

Die Referenzspannungen der NIR HSI Kamera beeinträchtigen den Pixelwert direkt am Sensor. Im Anhang 0 ist die Funktionsweise erklärt.

Mit der Veränderung dieser Werte ist es möglich, das Signal beliebig zu strecken, um den Wertebereich eines Pixels maximal auszunutzen. Bei einer Veränderung der MCT-Referenzspannungen kann man eine Verstärkung des Rauschens beobachten. Bei den Veränderungen der AD-Wandler Referenzspannungen ist nur eine Änderung der Signalintensität zu beobachten, es kommt nicht zu einer Veränderung des Rauschens. Durch Anpassung der jeweiligen Referenzspannungen kann das Signal-Rausch-Verhältnis verbessert werden, was zu einer höheren Datenqualität führt.

Bei einer Versuchsreihe mit dem Testpapier wurden optimierte Aufnahmeparameter für die maximale Ausnutzung des Dynamikbereichs der Pixelwerte genutzt (Tabelle 8.4).

3.5. Veränderung des Standardmaterials

Die für das Ausgangsmodell genutzten Spektren wurden gegen einen rauen Goldstandard aufgenommen. Bei den neuen Spektren, die mit dem Demonstrator aufgenommen wurden, wurde mit einem Spektralon-Standard gearbeitet. Die Änderung des Standards sollte einen Einfluss auf die Spektren haben, siehe Abbildung 3.5.1.

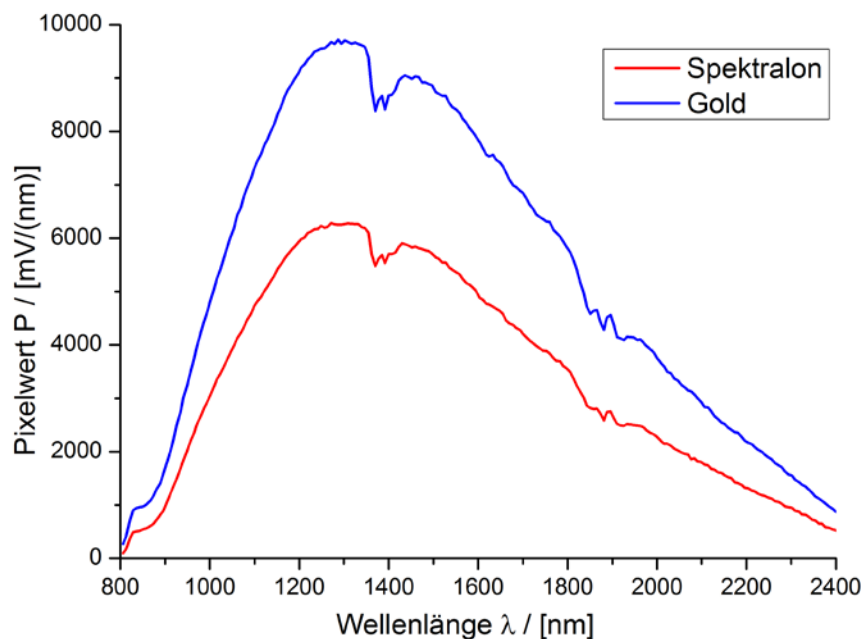


Abbildung 3.5.1 Vergleich der Standardmaterialien

3.6. Modifizierung des Ausgangsmodells

Bei dem Aufbau eines Modelles wird von einer Normalverteilung der Spektren eines Materials ausgegangen [3]. Die Robustheit eines chemometrischen Modells nimmt bei einer Erhöhung der Daten zu, so dass möglichst viele Spektren jedes Polymers zur Modellerstellung genutzt werden sollten [3].

Das Ausgangsmodell nach Tabelle 2.3 wurde dahingehend verändert, dass im modifizierten Modell 500 Spektren je Polymer genutzt wurden, (Modell I). Diese Spektren werden ebenso vorbehandelt und verarbeitet wie im Ausgangsmodell. Der Kalibrierdatensatz wurde ebenfalls vergrößert, auf 400 Spektren pro Polymer. Dem Testdatensatz wurde nach der Ausreißererkennung 81- 92 Spektren zugeordnet.

Jedes Polymer wurde einzeln untersucht. Bei einer Framerate von 100 Hz wurde für jedes Polymer ein Hypercube erzeugt. Nach dem Anwenden des Spektrenfilters waren 1206 – 8368 Spektren je Polymer verfügbar. Von diesen wurden die ersten 500 Spektren je Polymer für die Erstellung des Modell I genutzt.

3.7. Test der Reproduzierbarkeit

Die mittlere Erkennungsrate des chemometrischen Modells I sollte überprüft werden, siehe Kapitel 4.4. Dazu wurden die Polymere an einem anderen Tag erneut untersucht.

Bei den Aufnahmen der Polymere war es hierbei wichtig, die Spektren erst nach einer Aufwärmphase des HSI-Systems aufzunehmen. Nach dieser Aufwärmphase sollte sich das Offset eines Pixels nur noch unwesentlich ändern.

Bei dem Reproduzierbarkeitstest wurde darauf geachtet, dass dieselben Offsetwerte je Pixel vorlagen, bevor die eigentliche Messung durchgeführt wurde. Auch nach drei Stunden konnten nicht die gleichen Offsetwerte erzielt werden. Durch eine weitere Verlängerung der Aufwärmphase und die ständige Überwachung der Offsetwerte wurde festgestellt, dass sich die Offsetwerte nicht reproduzierbar änderten. Da alle Messparameter, die bis hierhin bekannt waren, konstant gehalten wurden, war nicht offensichtlich, weshalb diese Veränderung auftrat.

Um den Einfluss der Offsetveränderung auf die Erkennungsrate zu erhalten, wurde ein Offsetversuch durchgeführt. Es ist bekannt, dass die Offsetveränderung zeitlich langfristig auf einen Pixel einwirkt. Um eine Veränderung des Offsetwertes auszuschließen, wurde die Dunkelmessung vor jedem Aufnahmezyklus erneut durchgeführt.

Aufnahmezyklus für jedes Polymer:

- Dunkelmessung zur Bestimmung des aktuellen Offsets.
- Offsetvergleich I: Messung eines Polymers mit dem Demonstrator, mit dem aktuellen Offset.
- Offsetvergleich II: Erneute Messung des Polymers mit dem Demonstrator, hierbei wurde das Offset jedes Pixels um 100 reduziert.

Jedes Polymer wurde somit zweimal untersucht. Einmal mit dem aktuellen Offset und einmal mit einem verringerten Offset. Die ortsabhängigen Positionen der Polymere verändern sich nicht.

3.8. Faktoren der Offsetverschiebung

Zuerst wurde überprüft, ob die Veränderung des Offsets auch mit der ursprünglich zum HSI-System mitgelieferten Software beobachtet wird. Dazu wurden die Offsetwerte über einen Zeitraum von neun Stunden aufgezeichnet.

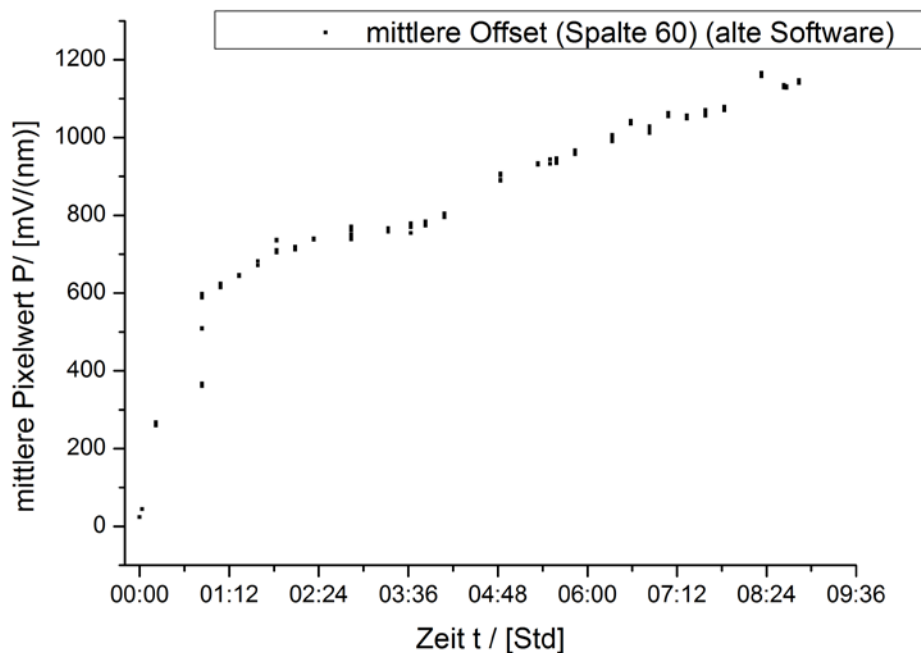


Abbildung 3.8.1 Offsetverschiebung bei Messungen mit der Herstellersoftware

Bei konstant gehaltenen Parametern wurde innerhalb von 9 Stunden ein Anstieg des mittleren Offsets um $1150 \left[\frac{\text{mV}}{\text{nm}} \right]$ detektiert. Dies zeigt, dass auch mit der Herstellersoftware die Offset-Veränderung registriert und nicht kompensiert werden.

Zur Erkennung einer Korrelation der Offsetveränderung zu anderen Parametern wurden Langzeittests durchgeführt. Es wurde festgestellt, dass das Rauschen geringfügiger auf das Signal einwirkt als die Offsetveränderung, siehe hierzu Kapitel 2.1.4.

Folgende Parameter wurden untersucht:

- Aufwärmphase des Detektors
- Veränderung der Signale am Detektor aufgrund dessen Nutzung
- Schwankung der Stromversorgung
- Erwärmung von
 - Kameragehäuse
 - Verschlusskappen
 - Optischen Bauteilen
 - Elektronik
 - Kabeln

4. Ergebnisse

4.1. Lichtquelle

Für den Demonstrator eignen sich Leuchtmittel, die elektromagnetische Strahlung im NIR-Bereich nach dem Planck'schen Strahlungsgesetz.

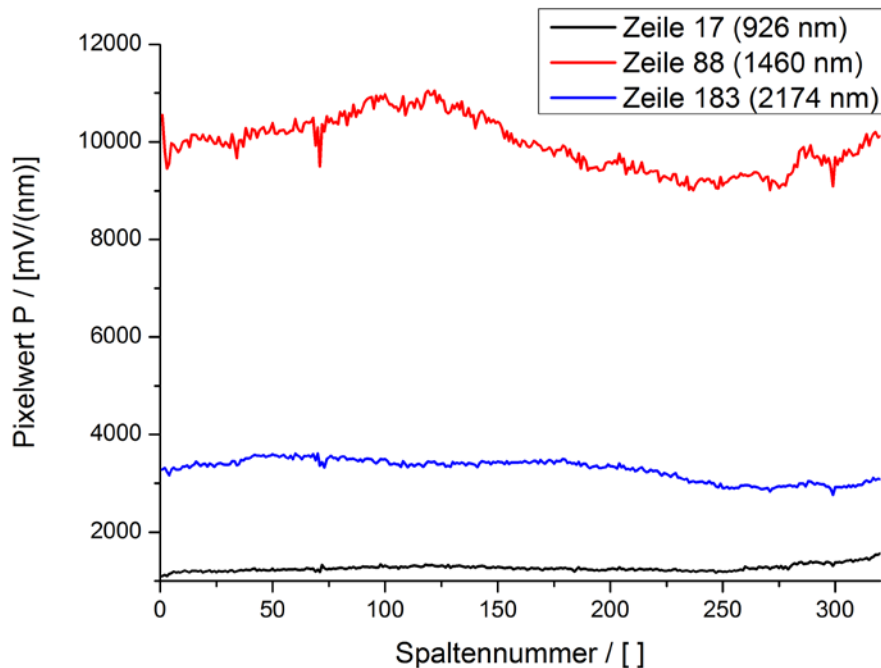


Abbildung 4.1.1 Verteilung der Intensität über die Zeilen/Aufnahmelinie

Die Verteilung der Intensität über die Aufnahmelinie ist in Abbildung 4.3.2 zu sehen. Es wurde eine relativ homogene Intensitätsverteilung über die gesamte Aufnahmelinie beobachtet.

4.2. Spektrenauswahl

Durch den Spektrenfilter ist es möglich, die chemometrischen Modelle mit einer größeren Anzahl Spektren zu testen.

Damit können qualifiziertere Aussagen über die aktuellen Messparameter erhalten werden. Es erscheint sinnvoll, einen an das Förderbandmaterial angepassten Filter auch im endgültigen Demonstrator zu hinterlegen, um die Anzahl der Spektren, die klassifiziert werden müssen, zu verringern.

Aufgrund der geringen Unterschiede in den Spektren des Materials „PMMA klar“ und des gelben Förderbandmaterials wurden Spektren dieses Materials durch den Filter entfernt. Eine weitere Verbesserung ist deshalb unbedingt notwendig.

Im endgültigen Softwareteil des Demonstrators ist vorgesehen, dass nur noch Werte für die spektralen Positionen berechnet werden, die das chemometrische Modell und der Spektrenfilter benötigen.

4.3. Erkennungsrate

Die mit dem neuen Aufbau erhaltenen Spektren sind im Vergleich mit denen, die für das chemometrische Ausgangsmodell, siehe Tabelle 2.3, genutzt wurden, in Abbildung 4.1.1 für PMMA weiß dargestellt. Die mittlere Erkennungsrate der Spektren der ersten Messung des Testpapiers betrug 3 %.

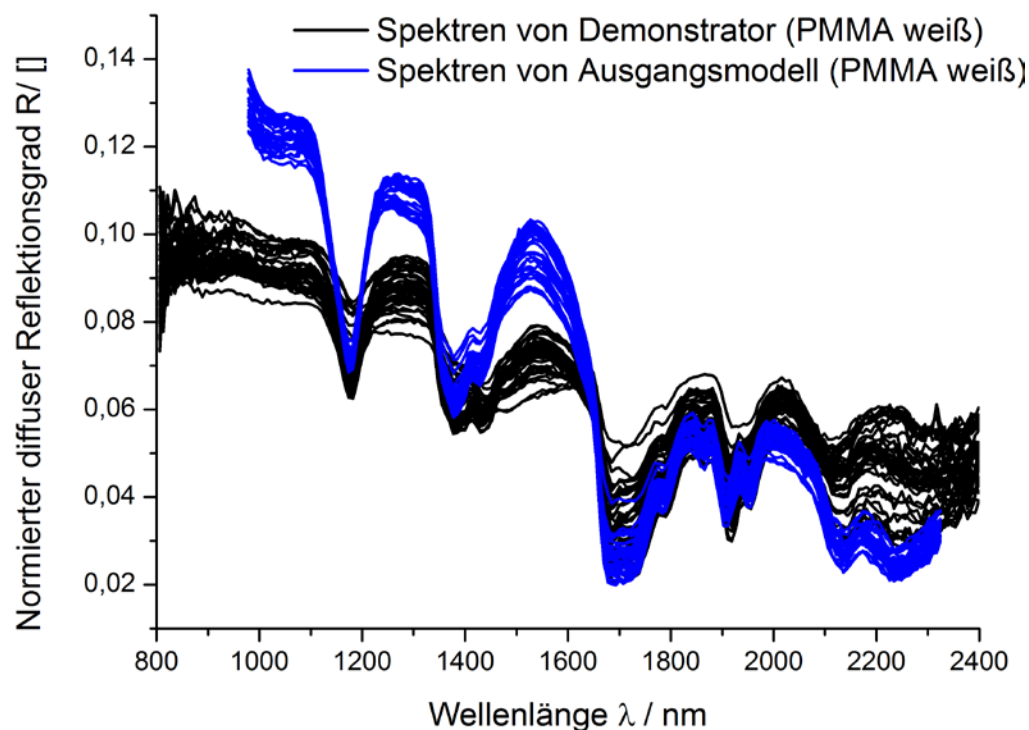


Abbildung 4.3.1 Auswahl von 40 Spektren des Polymers PMMA weiß

Die mittlere Erkennungsrate für 500 Spektren, die unter optimierten Parametern für die Ausnutzung des Dynamikbereiches eines Pixels gemessen wurden, stieg von 3% auf 6%. Auch bei Verwendung des rauen Goldstandards konnte die Erkennungsrate nur auf 7% erhöht werden.

Nach zahlreichen Testmessungen mit dem Testpapier musste festgestellt werden, dass sich die Spektren, die mit dem neuen Programm und dem neuen Aufbau erhalten wurden, so stark von den Spektren, die zum Erstellen des Ausgangsmodells genutzt wurden, unterscheiden, dass

das chemometrische Ausgangsmodell in der bisherigen Art nicht für die Klassifizierung der Kunststoffe geeignet ist und verändert werden muss.

4.4. Chemometrische Auswertung

Die Aufnahmen von Kapitel 3.6 wurden als Kalibrierdaten in das Ausgangsmodell geladen und so das Modell I erzeugt.

Die je 500 Spektren der 37 Kunststoffsorten wurden wie im Ausgangsmodell in 12 Klassen eingeteilt. Auch alle weiteren Einstellungen wurden beim modifizierten Modell (Modell I) wiederverwendet. Die mittlere Erkennungsrate des chemometrischen Modells I liegt bei dem Testdatensatz I von maximal 92 Spektren je Polymer unter der mittleren Erkennungsrate, die mit dem Ausgangsmodell erzielt wurde. Problematisch ist insbesondere die niedrigste Erkennungsrate des Polymers „PA6.6 weiß mit Lack“ zu sehen. Nur 55% der Spektren dieses Polymers wurden der richtigen Klasse (PA) zugeordnet. Da die Erkennungsrate als zu gering angesehen wurde, wurden alle vorhandenen Spektren jedes Polymers (Testdatensatz II) mit Modell I getestet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.1 dargestellt. Es wurde eine mittlere Erkennungsrate von 95% erzielt. Die niedrigste Erkennungsrate eines Polymers („SAN blau“) stieg auf 72%. Ein Testdatensatz (Testdatensatz I) von maximal 92 Spektren ist demnach nicht aussagekräftig. Es wird davon ausgegangen, dass 500 Spektren je Polymer als aussagekräftig betrachtet werden können, da ab dieser Anzahl von Testspektren keine Veränderung der niedrigsten Erkennungsrate auftrat.

Tabelle 4.1 Vergleich der chemometrischen Modelle

	Ausgangsmodell	Modell I	
Kalibrierdatensatz insgesamt	2764	14800	
		Testdatensatz I	Testdatensatz II
Getestete Spektren	647	3204	158852
Getestete Spektren pro Material (Testdatensatz)	7-23	81- 92	1206 - 8368
fehlerhafte Spektren	0	329	8234
Mittlere Erkennungsrate	100 %	89 %	95 %
Niedrigste Erkennungsrate	-	55 %	72 %

Es konnte eine hohe mittlere Erkennungsrate des neuen Modell I von 95% erzielt werden.

4.5. Offsetveränderung

Bei der Untersuchung der Polymere wurde bei der erneuten Aufnahme desselben ortsabhängigen Punkts des Materials ABS nach 2 Stunden festgestellt, dass eine Verschiebung der Spektren auftrat (siehe Abbildung 4.5.1).

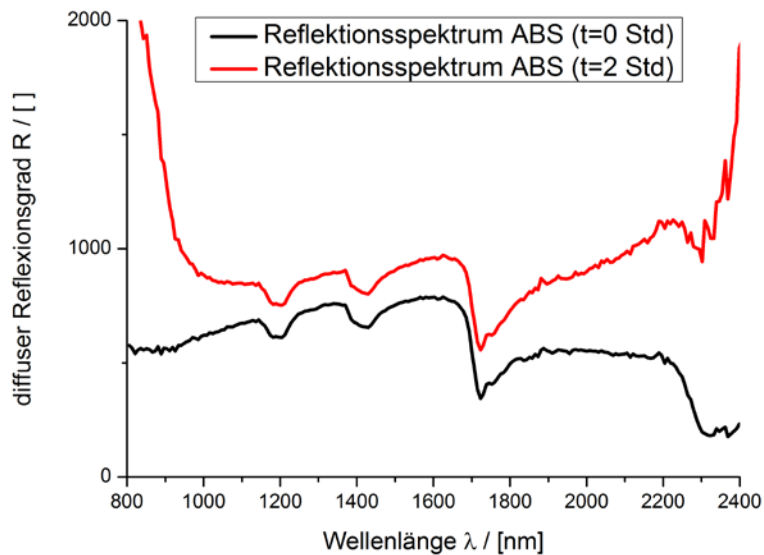


Abbildung 4.5.1 Vergleich der Reflexionsspektren des Materials ABS nach zwei Stunden

Diese Veränderung konnte auf eine Offset Erhöhung der Pixelwerte einer Spalte/Spektrum des Detektors zurückgeführt werden, siehe Abbildung 4.5.2.

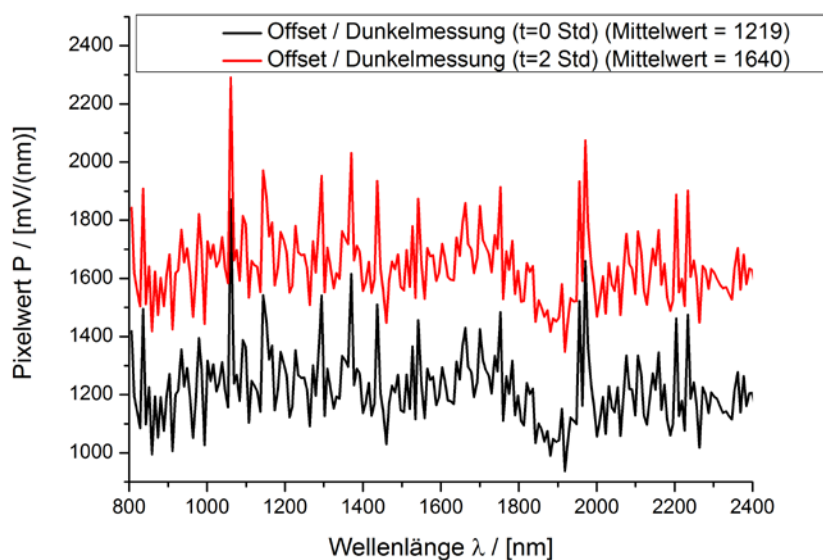


Abbildung 4.5.2 mittlere Offsetverschiebung der Spalte/Spektrum 60 nach zwei Stunden um $421 \left[\frac{\text{mV}}{\text{nm}} \right]$

Die Veränderung der Reflexionsspektren entstand dadurch, dass von beiden Einkanalspektren des Materials ABS dasselbe in der Software hinterlegte Offset abgezogen wurde. Dieser Offset wurde zum Zeitpunkt $t = 0$ Stunden in der Software hinterlegt und war nur für das erste ABS-Spektrum, welches ebenfalls zu diesem Zeitpunkt aufgenommen wurde, aktuell. Die beiden entstehenden Reflexionsspektren (Abbildung 4.5.1) weisen neben einer Niveauverschiebung zusätzlich eine Neigung zueinander auf.

Diese Neigung entsteht durch die Referenzierung (nach Gleichung 1, siehe Kapitel 2.1.3) auf das Standardmaterial, welches ebenfalls zum Zeitpunkt $t = 0$ aufgezeichnet wurde. Besonders in den spektralen Randbereichen – in Abbildung 4.5.3 orange markiert – fällt diese Veränderung auf.

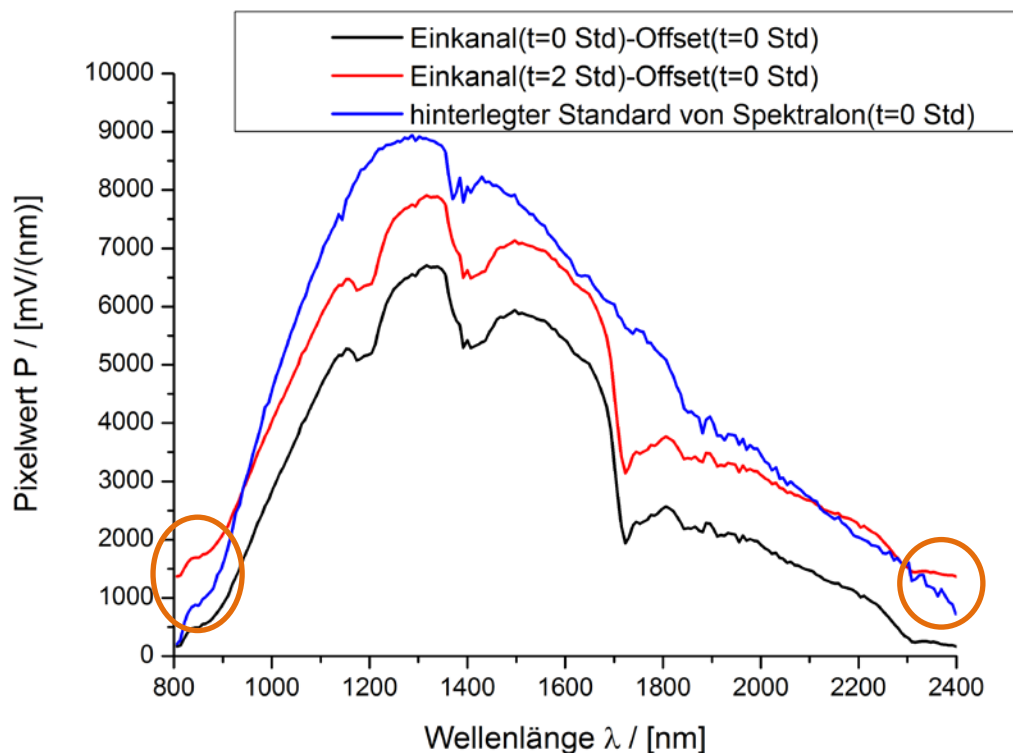


Abbildung 4.5.3 Einkanalspektren und softwarehinterlegter Standard

Nach der Vektornormierung der Spektren, Abbildung 4.5.4, fallen die Unterschiede der Spektren noch stärker auf. Im Bild sind diesmal auch die 19 Wellenlängen gekennzeichnet, welche in das chemometrische Modell eingehen.

Das Spektrum von ABS, welches sofort nach der Offset- und Standard-Messung bei $t=0$ Stunden aufgenommen wurde, wird richtig klassifiziert. Das Spektrum von ABS, welches 2 Stunden später registriert wurde, der Klasse PMMA – also falsch – zugeordnet.

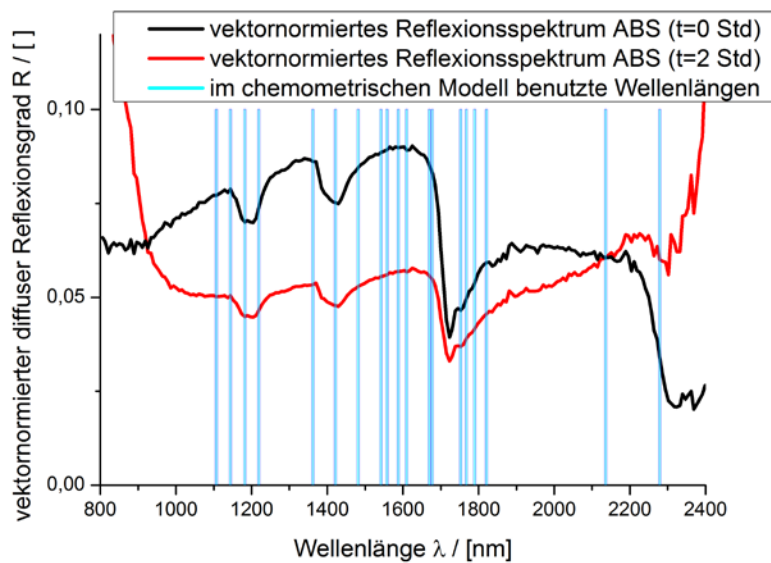


Abbildung 4.5.4 vektornormierte Spektren des Materials ABS

Würde zum Zeitpunkt $t=2$ Stunden eine Aktualisierung des softwarehinterlegten Offset durchgeführt werden, würde ein ähnliches Spektrum von ABS wie zum Zeitpunkt $t = 0$ Stunden entstehen und richtig klassifiziert werden. Eine Aktualisierung des softwarehinterlegten Offsets innerhalb kurzer Zeitintervalle wurde für den späteren Betrieb des Demonstrators vorerst ausgeschlossen.

Die Verschiebung der Offsetwerte bei der Untersuchung der Polymere, siehe Kapitel 3.7, war nach 6 Stunden so hoch, dass abgeschätzt wurde, dass der Einfluss einer solchen Offsetveränderung zu Einbußen der Erkennungsrate führt und dementsprechend nach der Ursache der Verschiebung des Offsets gesucht werden musste.

Es wurde also festgestellt, dass die Offset-Veränderung immer auftreten wird, siehe Kapitel 3.8. Um den Einfluss dieser Veränderung auf die Erkennungsleistung zu untersuchen, wurden Spektren mit einer definierten Offset-Veränderung aufgenommen. Vor jeder Spektrenaufnahme eines Polymers wurde eine Dunkelmessung durchgeführt. Jedes Polymer wurde zweimal untersucht. Einmal mit dem gegenwärtigen Offset und ein zweites Mal mit einem festgelegten verringerten Offset von $100 \left[\frac{mV}{nm} \right]$. Die Position der Polymere auf dem Papier wurde dazwischen nicht verändert. Bei der anschließenden Klassifizierung der beiden Testreihen wurde für jedes der 37 Polymere ein Testdatensatz von je 500 Spektren zusammengestellt.

Tabelle 4.2 Vergleich der Spektren bei unterschiedlichen Offset

	Offsetvergleich I (gegenwärtiges Offset)	Offsetvergleich II (um 100 Pixelwerte niedrigeres Offset)
getestete Spektren	18500	18500
fehlerhafte erkannte Spektren	2131	2755
mittlere	88 %	85 %
schlechtestes Material:	SAN gelb	ABS weiß
Niedrigste Erkennungsrate	55,6 %	27,8 %

Es wurde festgestellt, dass bei einem Offset der 100 $\left[\frac{mV}{nm}\right]$ niedriger ist (Offsetvergleich II), die mittlere Erkennungsrate um 3% auf 85% sinkt. Das Material mit der geringsten Erkennungsrate ist ABS weiß. Die Spektren wurden nur zu einem Viertel richtig klassifiziert. Das bedeutet, dass die Erkennungsraten für einzelne Materialien stark von der mittleren Erkennungsrate abweichen können. Bei den Spektren, die mit einem jeweils aktuellen Offset aufgenommen wurden, sind die Erkennungsraten besser. Sie sind aber nicht so gut, wie bei den Testspektren, die am gleichen Tag wie die Spektren des Kalibrierdatensatzes aufgenommen wurden, bei welchen eine Offset-Veränderung im Nachhinein nicht ausgeschlossen werden kann. Bei der geforderten Reinheit von 99% aller sortierten Polymere ist die Offset-Veränderung nicht akzeptabel.

Da die Offset-Veränderung der Spektren, die zur Aufstellung von Modell I verwendet wurden, nicht bekannt sind, kann dieses Modell nur zur Abschätzung der Erkennungsraten genutzt werden. Aussagekräftiger ist ein Modell, in welches Spektren eingehen, bei welchen eine Offset-Veränderung sicher ausgeschlossen werden kann, indem unmittelbar vor jeder Polymermessung das Offset bestimmt wird. Es ist auch möglich, ein Modell aufzustellen, in welches Kalibrierspektren eingehen, die mit unterschiedlichen Offsetwerten aufgenommen wurden. Am besten sollten diese Spektren an mehreren Tagen aufgenommen worden sein. Möglicherweise ist ein solches Modell robuster gegenüber der Veränderung des Offsets.

In Kapitel 3.8 wurde untersucht, ob es eine Korrelation zwischen der Offsetveränderung und anderen Parametern gibt.

Es konnte eine Abhängigkeit der mittleren Offsetpixelwerte von der Kühllufttemperatur festgestellt werden, wie in Abbildung 4.5.5 erkennbar ist.

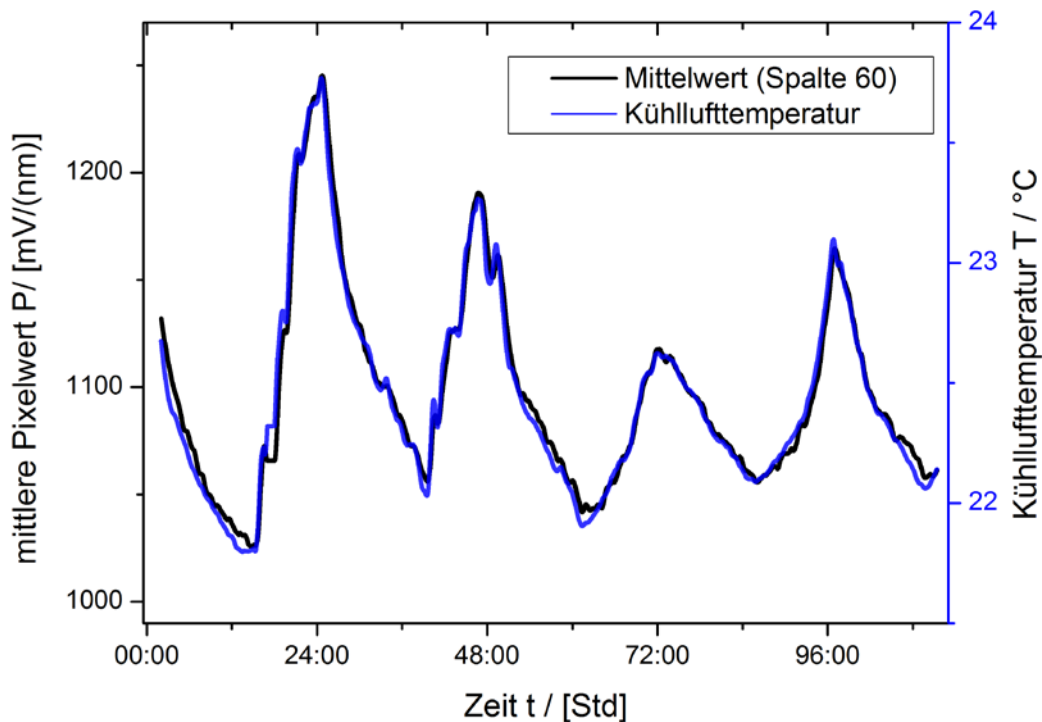


Abbildung 4.5.5 mittlerer Pixelwert von Spalte 60 und Kühllufttemperatur in Abhängigkeit von der Zeit

Um eine definierte Kühllufttemperatur zu messen, wurde zur definierten Kühlung der Kamera ein Belüftungskanal angebracht. Die Messung der Kühllufttemperatur erfolgte im Belüftungskanal. In Abbildung 4.5.5 sind die gemessene Kühllufttemperatur und der Mittelwert der Pixelwerte von Spalte 60 über einen Zeitraum von 110 Stunden aufgetragen. Bei einer Temperaturänderung von 2,0 Kelvin wird eine Offset-Veränderung von etwa 200 Pixelwerten festgestellt.

Eine lineare Korrelation zwischen Kühllufttemperatur und den Mittelwerten der Pixelwerte von Spalte 60 konnte festgestellt werden, siehe Abbildung 4.5.6.

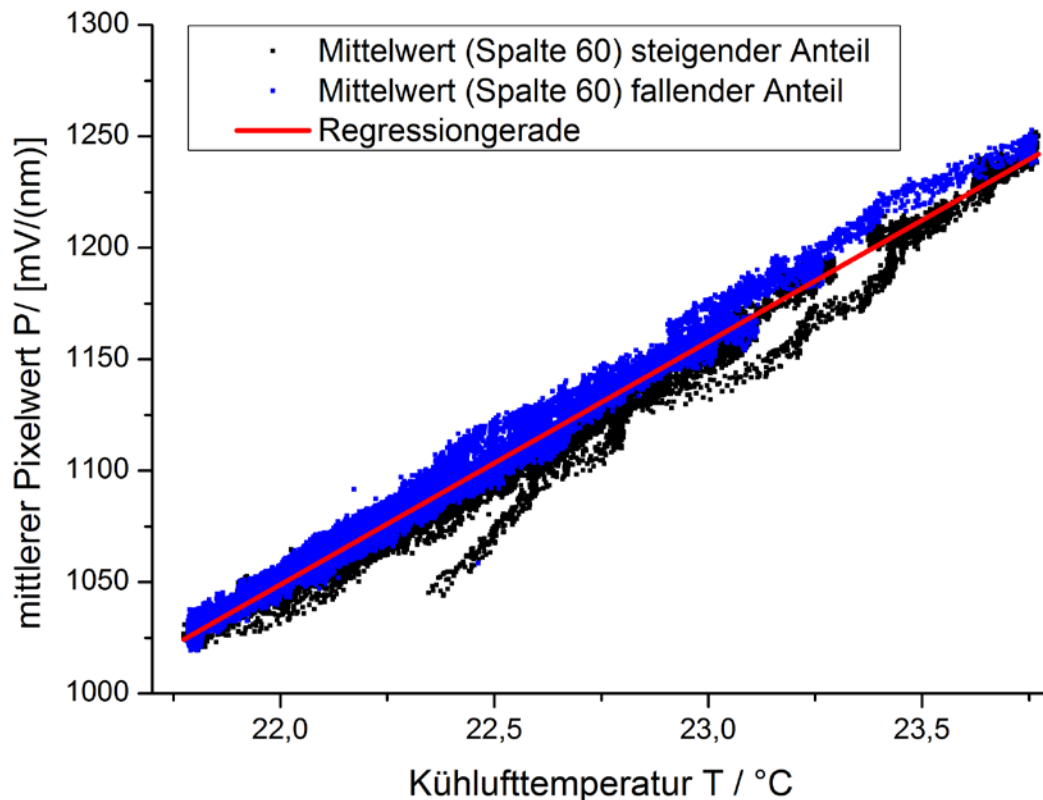


Abbildung 4.5.6 Lineare Abhängigkeit zwischen Kühllufttemperatur und Mittelwert der Pixelwerte von Spalte 60

In der Abbildung 4.5.6 sind dieselben Offsetwerte aus Abbildung 4.5.5 in Abhängigkeit der Temperatur dargestellt. Die Regressionsgerade wird mit folgender Funktion beschrieben:

$$P = 109,03 \left[\frac{mV}{nm \cdot K} \right] \cdot T - 1349,73 \left[\frac{mV}{nm} \right]$$

Zusätzlich wurden die Pixelwerte in temperaturabfallende (blau markiert) und -ansteigende Messpunkte (schwarz markiert) unterteilt. Die Messpunkte die unter steigenden Temperaturen aufgezeichnet wurden, befinden sich mehrheitlich unterhalb der Regressionsgerade. Die Messpunkte, die unter fallenden Temperaturen registriert wurden, liegen mehrheitlich über der Regressionsgerade.

Die lineare Abhängigkeit der Offsetwerte von der Kühllufttemperatur kann nur beobachtet werden, wenn die Aufwärmphase abgewartet wird und sich ein Temperaturgleichgewicht eingestellt hat. Bei simulierten zeitlich schnellen und hohen Temperaturveränderungen ist die Abhängigkeit zwischen Kühlluft- und Offsetveränderung sehr gut sichtbar. Aufgrund der Wärmekapazität der Kamera und des benutzten Thermometers ändert sich das Offset zeitlich verzögert zur Temperaturänderung, siehe Abbildung 4.5.7.

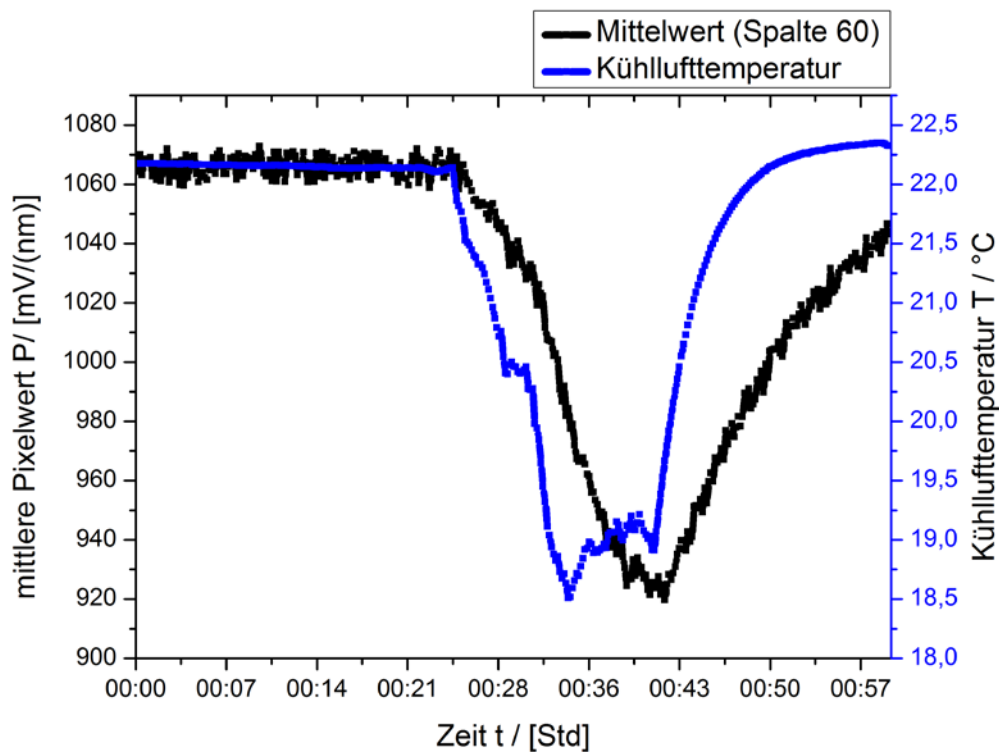


Abbildung 4.5.7 Kühllufttemperatur und Mittelwert der Pixelwerte von Spalte 60 bei einer zeitlich schnellen und hohen Temperaturveränderungen in Abhängigkeit von der Zeit

Die Temperatur, welche vom Detektor der Kamera registriert wurde, lag bei allen Messungen (Abbildung 4.5.5 bis 4.5.7) bei -64°C .

Die Aufwärmphase des NIR HSI Systems wurde durch die Dauertests charakterisiert. Es zeigte sich, dass die Aufwärmphase ca. 2 Stunden dauert. Innerhalb dieser Zeitspanne sind keine reproduzierbaren Messungen möglich.

Nach Herstellerangaben soll die HSI-Kamera konstante Signale auch bei veränderten Kühllufttemperaturen liefern. Hierfür wurden vom Hersteller bestimmte Parameter vorgeschlagen, die für die Dauertests 2 – 4 in Tabelle 4.3 in der Software geändert wurden.

Tabelle 4.3 Vergleich der Offsetveränderung bei veränderten Parametern

	In der Software veränderte Detektor- kühlungs- temperatur	In der Software veränderter Offset- temperatur Parameter	Regressionsgerade – Auswertung analog zu Abbildung 4.5.6
Ausgangs- dauermessung (Abbildung 4.5.6)	-64°C	0	$P = 109,027 \left[\frac{mV}{nm \cdot K} \right] * T - 1349,72 \left[\frac{mV}{nm} \right]$
Messreihe 2	-58°C	0	$P = 107,37 \left[\frac{mV}{nm \cdot K} \right] * T - 455,86 \left[\frac{mV}{nm} \right]$
Messreihe 3	-64°C	10	$P = 130,56 \left[\frac{mV}{nm \cdot K} \right] * T - 2723,79 \left[\frac{mV}{nm} \right]$
Messreihe 4	-58°C	10	$P = 118,96 \left[\frac{mV}{nm \cdot K} \right] * T - 2191,089 \left[\frac{mV}{nm} \right]$

Jede Dauermessung wurde über ca. 30 Stunden durchgeführt. Es zeigte sich, dass der Anstieg der Regressionsgerade (siehe Tabelle 4.3 rot markiert) mindestens $100 \left[\frac{mV}{nm \cdot K} \right]$ beträgt. Bei Änderung der Kühllufttemperatur von 1 Kelvin tritt somit ein Anstieg der Pixelwerte von mindestens $100 \left[\frac{mV}{nm} \right]$ auf.

Die Temperatur des Labors, in welchem der Demonstrator derzeit arbeitet, liegt bei 23°C und schwankt um ± 1 Kelvin. In einer Werkhalle, in welchem der Demonstrator bzw. die Sortieranlage später aufgebaut sein wird, ist darauf zu achten, dass die zur Kühlung genutzte Luft temperiert ist. Nur wenn reproduzierbare Daten mit gleichem Offset aufgenommen werden, ist die Anwendung des bisherigen chemometrischen Modells zur richtigen Klassifizierung der Materialien mit der geforderten Güte möglich. Weiterhin ist es wie erwähnt denkbar, schon bei der Aufstellung des chemometrischen Modells Spektren, die mit verschiedenen Offsets aufgenommen wurden, zu verwenden. Möglicherweise führt dieser Weg dazu, dass die realen Offset-Änderungen nicht zu einer Fehlklassifizierung von Materialien führen. Ansonsten wären weitere Möglichkeiten zur Reduzierung der Offset-Änderung denkbar:

- Anpassung der Parameter der HSI Kamera
- Aufzeichnung der Kühllufttemperatur mit anschließender Signalkorrektur
- Regelung der Kühllufttemperatur
- Durchführung regelmäßiger Dunkelmessungen zur Aktualisierung des Offsets

5. Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es, einen Demonstrator aufzubauen mit welchem eine Klassifizierung von Polymeren mit Hilfe des Nahinfraroten Hyperspektralen Imaging Systems möglich ist.

Hierfür wurde ein Aluminiumgestell aufgebaut, das als Halterung für die Lichtquellen, die Blenden, das Kamerasystem und den Belüftungskanal dient. Für die Positionierung dieser Bauteile wurden verschiedene Möglichkeiten getestet und optimierte Einstellungen aller Komponenten festgelegt. Die Lichtquellen wurden auf ihre Eignung untersucht und die geeignetsten wurden am Demonstrator verwendet.

Es wurde gezeigt, dass durch die Veränderung der Softwareparameter eine Verbesserung der Aufnahmen möglich ist. Es wurde ein Spektrenfilter entwickelt, der es ermöglicht, automatisiert Polymerspektren aus einem Hypercube zu extrahieren.

Das chemometrische Modell I zur Erkennung der Polymere wurde mit Daten einer einzigen Aufnahmereihe erarbeitet und weist für diese Aufnahme eine hohe Erkennungsrate auf. Beim Testen dieses Modells zeigte sich, dass die Veränderung der Kühllufttemperatur, die der Kamera zugeführt wird, zu einer Offsetverschiebung und damit zu einer Verschlechterung der Erkennungsrate der Polymere mit dem chemometrischen Modell führt.

Deshalb wurden das Rauschen und das Offset des Detektors untersucht. Dies führte zur Verwendung des Belüftungskanals und thermisch isolierender Folien, mit welchen eine thermische Kapselung des Kamerasystems vorgenommen wurde. Der Belüftungskanal versorgt das Kamerasystem mit ausreichend Kühlluft innerhalb der Kapselung.

Das Testen der chemometrischen Modelle hat gezeigt, dass die Erkennungsraten erst mit mehreren Testdatensätzen aussagekräftig werden.

Die Aufwärmphase des NIR HSI Systems dauert 2 Stunden. Innerhalb dieser Zeitspanne sollten keine Aufnahmen durchgeführt werden.

6. Ausblick

Es konnte gezeigt werden, dass bekannte Polymere richtig klassifiziert werden können. Eine Reproduzierbarkeit der Messungen der Polymere ist trotz der Offsetverschiebung möglich, führt aber zu niedrigeren Erkennungsraten. Aussagekräftiger ist ein Modell, in welches Spektren eingehen, bei welchen eine Offset-Veränderung sicher ausgeschlossen werden kann. Es ist auch möglich, ein Modell aufzustellen, in welches Kalibrierspektren eingehen, die mit unterschiedlichen Offsetwerten aufgenommen wurden. Dafür sollte ein Plan aufgestellt werden, damit diese Spektren an mehreren Tagen unter definierten – auch unterschiedlichen – Bedingungen aufgenommen werden. Möglicherweise ist ein mit diesen gemessenen Spektren aufgestelltes chemometrisches Modell robuster gegenüber der Veränderung des Offsets.

Durch die Klassenbildung innerhalb des chemometrischen Modells ist ein Trennen der einzelnen Polymere nach Farben nicht gewährleistet. Durch Hinzufügen eines Hyperspektral Imaging Systems, welches Spektren im Bereich zwischen 400 nm und 1000 nm aufnimmt, ist eine Sortierung nach Farben und chemischer Strukturen möglich.

Die Klassifizierung der Polymere erfolgt bisher in einer weiteren Software neben der Steuersoftware. Die Einbindung der Auswertung in die Steuersoftware des HSI-Systems ist vorgesehen, damit eine online Klassifizierung erfolgen kann. Die Anforderung an die dafür benötigte Rechenleistung ist sehr hoch und ein ausschlaggebender Punkt, um die Anlage außerhalb der Labormaßstäbe einzusetzen.

In der Steuersoftware sollte eine Anpassung des entwickelten Spektrenfilters hinsichtlich des zukünftig verwendeten Förderbandmaterials und der im chemometrischen Modell verwendeten Wellenlängen durchgeführt werden.

Für den Demonstrator wurden gute Lichtquellen ausgewählt. Eine Verbesserung der Lichtquellen für eine noch bessere Ausnutzung des Dynamikbereiches der Pixelwerte sollte angestrebt werden.

Zur thermischen Kapselung der Kamera wurden bisher thermische Aluminiumfolien eingesetzt. Diese Folien sollten langfristig durch eine geeignete Einhausung ersetzt werden.

7. Literaturverzeichnis

- [1] S. Albrecht, „Bachelorarbeit Hyperspectral-Imaging von Polymeren,“ 2012.
- [2] J. d. P. W. P. Atkins, „Physikalische Chemie.,“ WILEY-VCH Verlag GmbH.
- [3] R. W. Kessler, „Prozessanalytik,“ Wiley -vch Verlag GMBH & CO, Weinheim, 2006.
- [4] J. J. B. T. Georgiev, „Long-term calibration monitoring of Spectralon diffusers BRDF in the air-ultraviolet,“ 2007.
- [5] Günzel/Böck, „IR- Spektroskopie Eine Einführung,“ 1983.
- [6] H. H. Binder, „Lexikon der chemischen Elemente,“ S. Hirzel Verlag, Stuttgart , 1999.

8. Anhang

8.1. Benutzten Wellenlängen in den chemometrischen Modellen

Tabelle 8.1 Verwendeten Wellenlängen in den chemometrischen Modellen

Wellenlänge in nm	Zeile auf dem Detektor
1107	41
1144	46
1182	51
1219	56
1362	75
1422	83
1482	91
1542	99
1558	101
1588	105
1610	108
1670	116
1678	117
1753	127
1768	129
1790	132
1821	136
2136	178
2279	197

8.2. Erklärung der Referenzspannungen

Es gibt zwei Paare von Referenzspannungen. Das erste Paar verändert den Analog-Digitalwandler (AD-Wandler engl. „analog to digital converter“ abgekürzt: mit ADC)

Das zweite Paar beeinflusst den Quecksilber Cadmium Tellurid Detektor (MCT).

Anhand des ersten Paares (ADC) wird nun verdeutlicht, wie diese Referenzspannungen auf den Pixelwert einwirken. Die beiden Referenzspannungen für den Analog-Digitalwandler, heißen „ADC V-IN“ und „ADC V-Ref“. Beide werden mit einem internen exakten Spannungsgeber versorgt. Die „ADC V-IN“ Spannung hat einen Wertebereich von 0,000 Volt bis 5,000 Volt. Die „ADC V-Ref“ Spannung kann zwischen 0,000 Volt und 2.048 Volt liegen. Die Werte werden mit 3 Kommastellen angegeben. Die Übertragung vom Computer zur Kamera erfolgt mit dem Datentyp „float“ mit einer Genauigkeit von 7 Kommastellen. Deswegen kommt es zu einem Konvertierungsfehler, der nicht genau abgeschätzt werden kann. Wie stabil die beiden Referenzwerte gehalten werden können, ist ebenfalls nicht bekannt.

Das Signal eines Pixels vor dem AD-Wandler liegt zwischen null und fünf Volt. Der nutzbare Anteil des Signales ist geringer, z. B. zwischen 3 und 5 Volt. Um den Wertebereich eines Pixels maximal auszunutzen, wird dieser Spannungsteil mit einem unteren Schwellwert abgetrennt. Dieser wird „ADC V-IN“ genannt. Dieses Teilsignal muss wiederum verstärkt werden, um den Dynamikbereich des AD-Wandlers, der zwischen 0 Volt und 5 Volt liegt, auszunutzen. Diese Verstärkung wird durch die „ADC V-Ref“ Spannung beeinflusst. Das verstärkte Teilsignal wird vom AD-Wandler zu einem 14 Bit digitalisiert. Dies bedeutet, dass der Pixelwert zwischen 0 und 16383 liegt.

8.3. Übersicht softwareseitige Parameter

Tabelle 8.2 Unterschiede zwischen den Herstellersoftware und nun vorhandener Software

Parameter	Selbst produzierte Software	Herstellersoftware
Fehlpixel des Detektors	Einstellbar	Festgelegt
Pixelwertoffset	50-500 x Dunkelmessung	1 x Dunkelmessung
Hinterlegen eines Standards	50-500 x Aufnahme des spaltenabhängige Standardmaterials	Nicht möglich
verwendeter Ausschnitt des Detektors	Einstellbar	Festgelegt
Verarbeitungsalgorithmus	bekannt	ist nicht bekannt
Reproduzierbarkeit	Speichern und laden aller Einstellungen möglich	Speichern und laden aller Einstellungen möglich
Enthalten in Datei	27.05.13.FDP	120414-3000 μ s_2450.xca Dark.tif Gain.tif Offset.tif

8.4. Hardwareseitige Parameter der NIR Kamera

Tabelle 8.3 Parameter der NIR Kamera bei der Aufnahme der Spektren für Modell I

Name	Arbeitsbereich	Verwendeter Wert	Bedeutung
CapWoiCount		0	
CapCameraLink		1	
CapPreview		1	
IntegrationTime	0.025>107374182.375	4000	Belichtungszeit
IntegrationTimeOffset	-1000>1000	0	
ADCVIN	0>5.000	2,289	Referenzspannung
ADCVREF	0>2.048	0,982	Referenzspannung
SensVIN	0>2.048	1,084	Referenzspannung
SensVREF	0>2.048	0.847	Referenzspannung
SensFrameRate	0>305	100	Framerate
ImageSource		0	
ImgInvert		0	
Fan	0-1	1	Lüftung aus/ein
PWM	0>4095	0	
P	0>4095	3000	
I	0>4095	200	
D	0>4095	1	
SETTLE	159.15>303.15	209.15	Zieltemperatur des Detektors in Kelvin
TemperatureOffset	-100>100	0	
CaptureMode	0-5	1	
Temperature	173.15>223.15	206.08	
TemperatureRaw		21865	
_CAM_VER		86.24	
_INT_REV		15246	
_CAM_PID		34576	
_CAM_SER		2540	
_API_FPC_BFRNUM	0>64	16	
_API_FPC_DROPS		0	
_API_OVL_ALPHA	0>100	95	

8.5. Parametersatzsuche

Tabelle 8.4 Suche der idealen Parameter für die Messungen des Testpapiers

Parameter	Messung 1	Messung 2	Messung 3	Messung 31	Messung 70	Messung 116
Spalt in μm	40	40	40	25	25	40
Objektiv	f = 25mm	f = 25mm	f = 25mm	f = 25mm	f = 25mm	f = 25mm
Belichtungszeit in μs	5000	5000	3000	3500	4000	3500
Framerate in Hz	50	50	50	100	100	100
Standard	nein	breitgerechneter Goldstandard 2	nein	Polystandard2 (25 μm Spalt)(4221-0626)	Standard vom 27-05-13.csv	Gold 27.05.13.FPD
Wellenlänge in nm	994-2302	994-2302	994-2302	798-2542	798-2542	806 – 2362 nm
Mit Ausgangsmodell Getestete Spektren		300		500	4826	500
Erkennungsrate		3%		5%	6%	7,03%

8.6. Hauptkomponentenanalyse

Tabelle 8.5 Spektren des Polymers PMMA klar, die durch die Hauptkomponentenanalyse als Ausreißer erkannt wurden

Hauptkomponente	Zeilennummer	Abweichung
4	Sample 264	4,487863
1	Sample 295	3,481917
3	Sample 60	3,202585
4	Sample 118	3,893175
2	Sample 135	3,451699
1	Sample 154	4,101668
1	Sample 238	3,124782
	...	

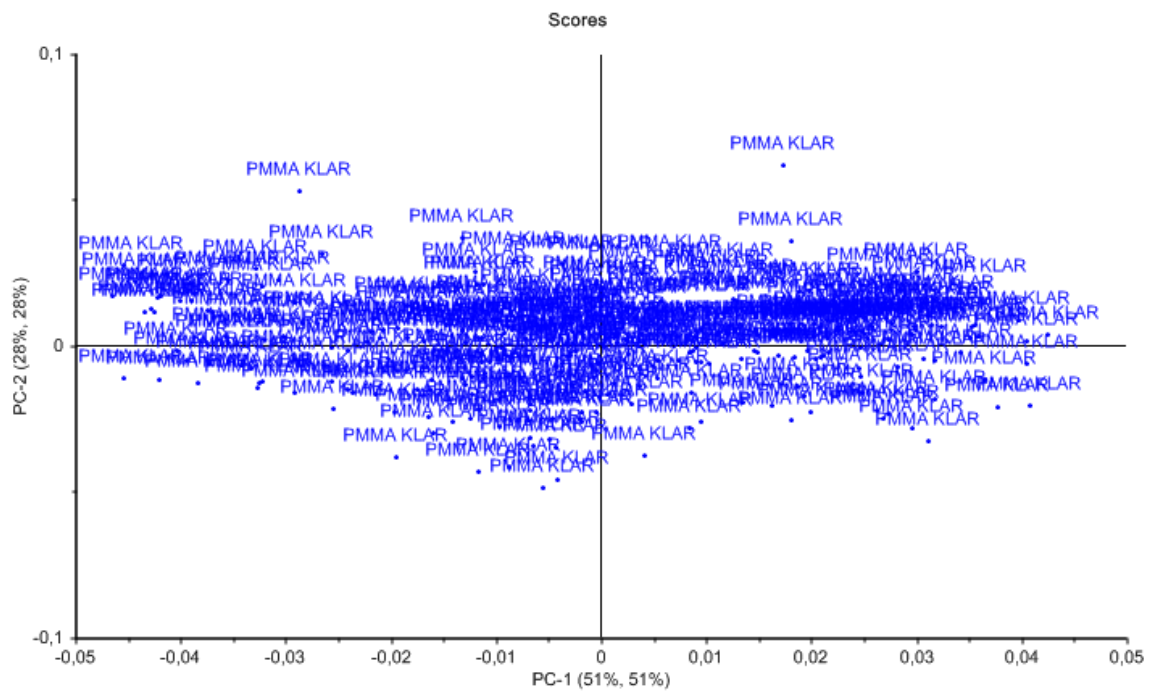


Abbildung 8.6.1 Ausreißerererkennung anhand einer Hauptkomponentenanalyse

8.7. Verwendetes Temperaturmessgerät

PTB – AG 3.21/Spurenfeuchte

Protokoll der Kalibrierung eines Platin-Widerstandsthermometer (PRT)

Typ/Hersteller : Pt100/TEMPERATURE PRODUCTS
Seriennummer 000263 *≅ Nr. 1*
durchgeführt am: 14.01.2005
von: A: Wiegmann
Auftraggeber: Fraunhofer Institut für Werkstoff- und Strahltechnik (IWS)
Abt. CVD-Dünnschichttechnologie
Winterbergstraße 28, 01277 Dresden

Kalibrierverfahren:

Die Kalibrierung erfolgte durch Messung des PRT-Widerstandes bei definierten Referenz-Temperaturen unter Verwendung eines HP-Multimeter 3458A (OhmF-Funktion/ 4w-Schaltung mit 1mA Stromfluss). Die Referenztemperaturen wurden in einem Hart Scientific High Precision Bath Typ 7041 eingestellt und mit TINSLEY Pt25-Widerstandsthermometern (S/N 263 615 und 263 616) in Verbindung mit PAAR-Messbrücke MKT25 (S/N 088 626) gemessen. Die verwendeten Messgeräte sind PTB-kalibriert.

Messergebnisse:

Referenztemperatur (°C)	Messunsicherheit der Referenztemperatur (K)	Pt100-Widerstand (Ω)	Messunsicherheit des PRT-Widerstandes (Ω)
0,228	0,002	100,0267	0,0003
10,023	0,002	103,9165	0,0003
20,015	0,002	107,8735	0,0003
30,004	0,002	111,8177	0,0004
39,987	0,002	115,7462	0,0004
49,983	0,002	119,6686	0,0004
59,984	0,002	123,5835	0,0005

Die aufgeführten Temperatur- und Widerstandswerte sind die Mittelwerte von 5 Einzelwerten, gemessen bei thermisch stabilen Bedingungen über einen Zeitraum von jeweils 5 Minuten. Für die allgemeine Widerstandsfunktion $R(t) = A + B \cdot t + C \cdot t^2$ eines PRT ergeben sich aus diesen Messergebnissen für den Temperaturbereich $0^\circ\text{C} \leq t \leq 60^\circ\text{C}$ folgende Koeffizienten:

$$\begin{aligned}A &= 99,966 \\B &= 0,394207 \\C &= 0\end{aligned}$$

Die erweiterte Messunsicherheit dieser Ausgleichsfunktion beträgt 0,001 Ω bzw. 0,003 K. Bei anderer Messanordnung und/oder Messstromstärke muss infolge anderer Eigenerwärmung des PRT mit etwas anderer Messunsicherheit gerechnet werden.


Arndt Wiegmann

ASSYST_KalPRT100Nr263.doc

Abbildung 8.7.1 Protokoll der Kalibrierung für verwendetes Temperaturmessgerät

9. Danksagung

Prof. Dr. Bernhard Steiger danke ich für die Unterstützung bei der Bearbeitung dieses Themengebietes, welches am Fraunhofer IWS Dresden durchgeführt wurde. Besonderer Dank gilt meinem Betreuer Dr. Philipp Wollmann, der mich bei der Durchführung dieser Arbeit unterstützte. Meinen Kollegen am Fraunhofer IWS Dresden danke ich für die tolle Arbeitsatmosphäre, insbesondere bei Beate Leupolt, die mich bei der Korrektur der Arbeit tatkräftig unterstützt hat.

10. Selbständigkeitserklärung

Ich erkläre, dass ich die vorliegende, unter der Betreuung von Dr. Philipp Wollmann angefertigte Bachelorarbeit selbständig verfasst habe. Andere als die angegebenen Hilfsmittel wurden von mir nicht benutzt. Alle angeführten Zitate wurden kenntlich gemacht.

Dresden, den 29.07.2013